



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Sep 28, 2025 – 02:34 PM EDT

PDB ID : 9ON8 / pdb_00009on8
BMRB ID : 31245
Title : Immature HIV-1 CACTD-SP1 lattice with Maturation inhibitor PF-46396 (R) and Inositol hexakisphosphate (IP6)
Authors : Zadorozhnyi, R.; Quinn, C.M.; Zadrozny, K.K.; Ablan, S.D.; Kennedy, B.J.; Yap, G.P.A.; Sanner, D.; Kraml, C.; Freed, E.O.; Ganser-Pornillos, B.K.; Pornillos, O.; Gronenborn, A.M.; Polenova, T.
Deposited on : 2025-05-14

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
buster-report	:	1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.46

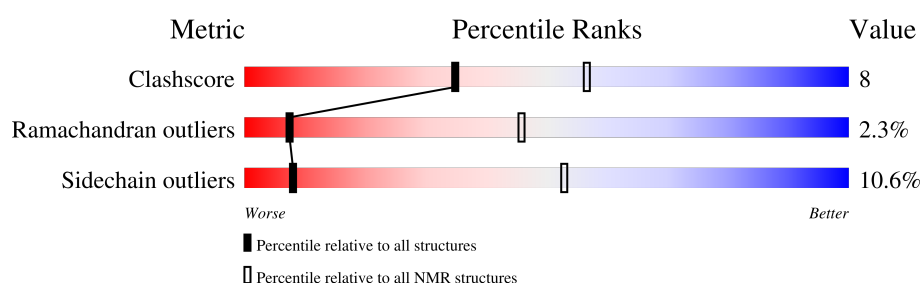
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLID-STATE NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 6%.

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	210492	14027
Ramachandran outliers	207382	12486
Sidechain outliers	206894	12463

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	G	102	
1	H	102	
1	I	102	
1	J	102	
1	K	102	
1	L	102	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	G:147-G:239, H:146-H:239, I:148-I:222, I:226-I:235, J:146-J:238, K:148-K:237, L:148-L:238 (546)	0.72	4

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 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9410 atoms, of which 4703 are hydrogens and 0 are deuteriums.

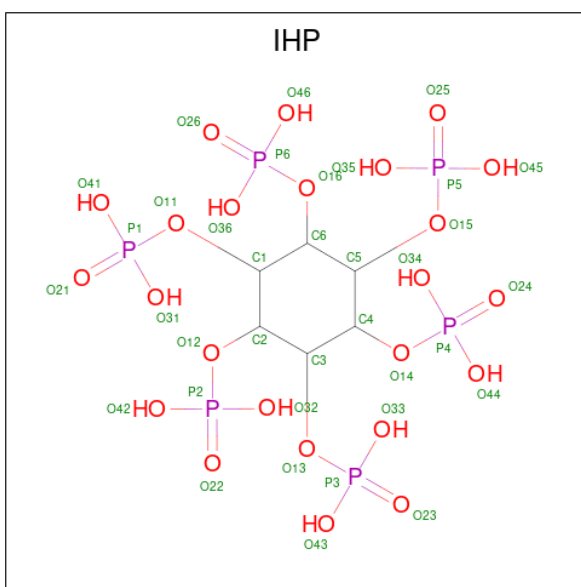
- Molecule 1 is a protein called Capsid protein p24.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	G	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	H	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	I	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	J	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	K	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	L	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	

There are 18 discrepancies between the modelled and reference sequences:

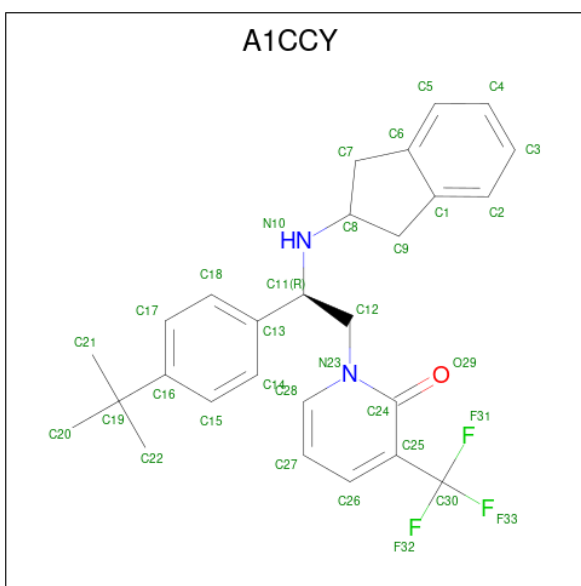
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
G	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
G	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
G	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
H	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
H	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
H	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
I	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
I	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
I	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
J	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
J	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
J	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
K	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
K	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
K	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
L	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
L	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
L	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497

- Molecule 2 is INOSITOL HEXAKISPHOSPHATE (CCD ID: IHP) (formula: $C_6H_{18}O_{24}P_6$) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



Mol	Chain	Residues	Atoms				
2	H	1	Total	C	H	O	P
			42	6	6	24	6

- Molecule 3 is 1-{(2R)-2-(4-tert-butylphenyl)-2-[(2,3-dihydro-1H-inden-2-yl)amino]ethyl}-3-(trifluoromethyl)pyridin-2(1H)-one (CCD ID: A1CCY) (formula: $C_{27}H_{29}F_3N_2O$) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



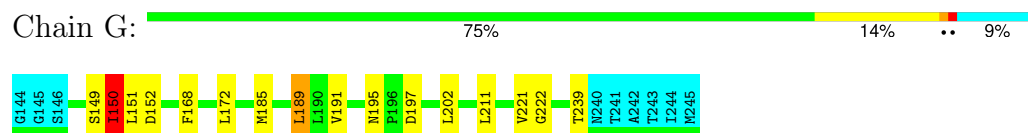
Mol	Chain	Residues	Atoms					
3	H	1	Total	C	F	H	N	O
			62	27	3	29	2	1

4 Residue-property plots

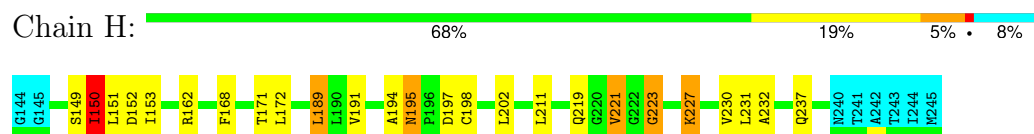
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

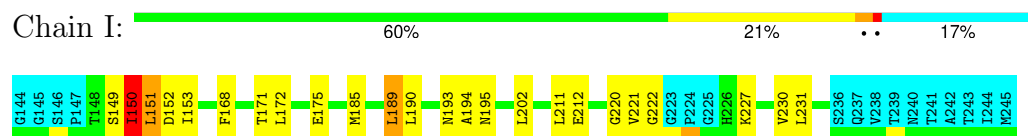
- Molecule 1: Capsid protein p24



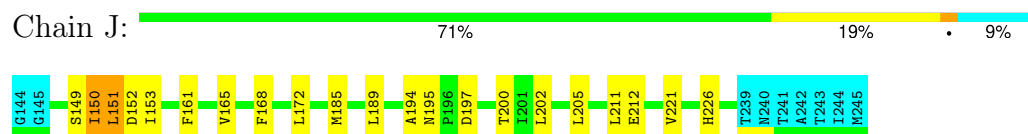
- Molecule 1: Capsid protein p24



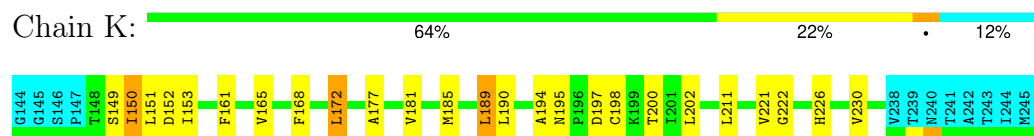
- Molecule 1: Capsid protein p24



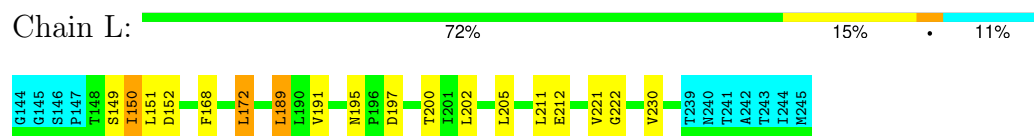
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

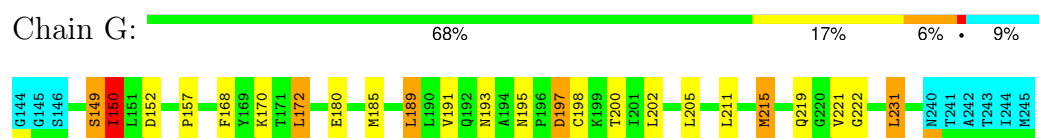


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

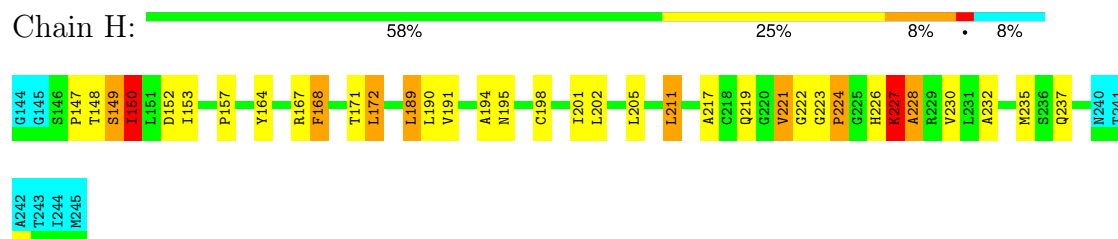
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

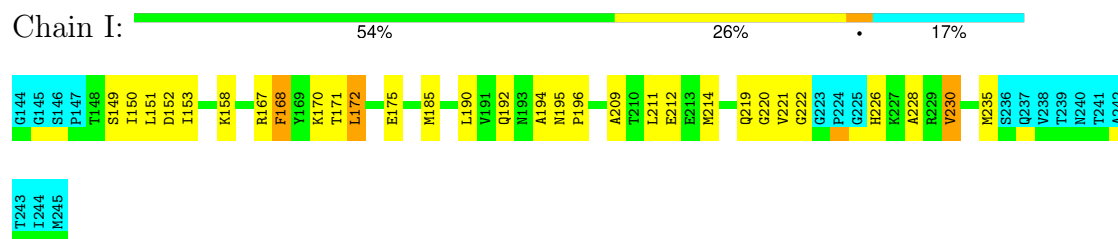
- Molecule 1: Capsid protein p24



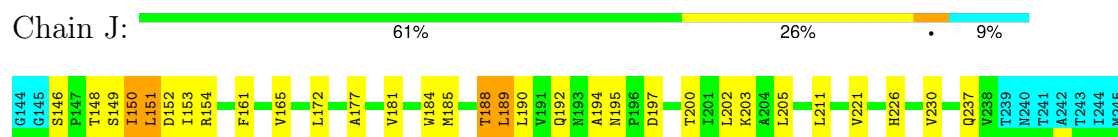
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

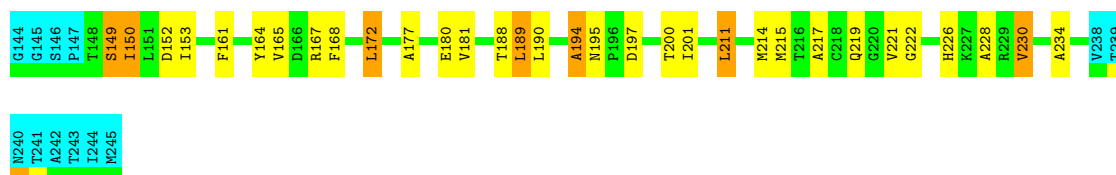


- Molecule 1: Capsid protein p24

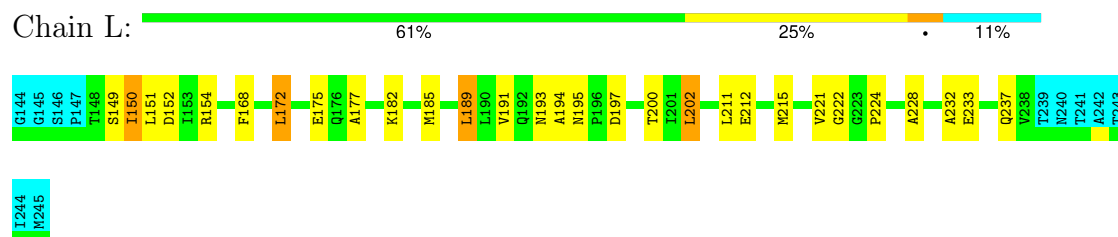


- Molecule 1: Capsid protein p24



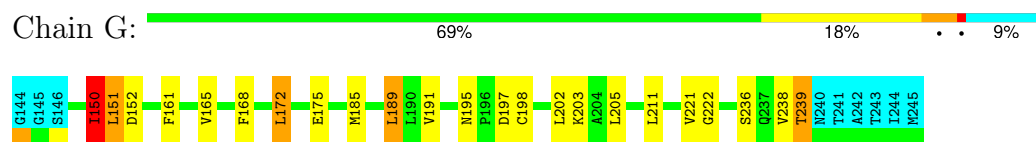


- Molecule 1: Capsid protein p24

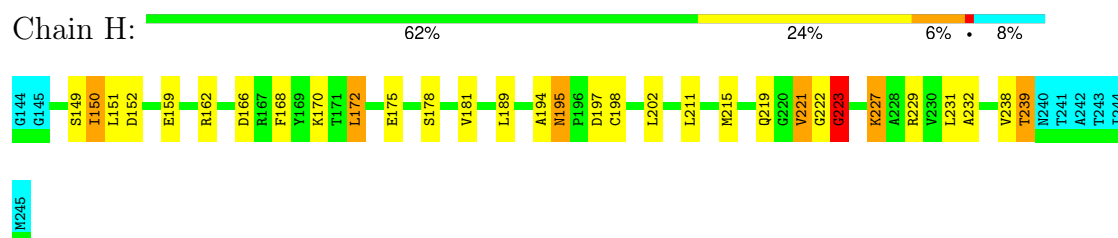


4.2.2 Score per residue for model 2

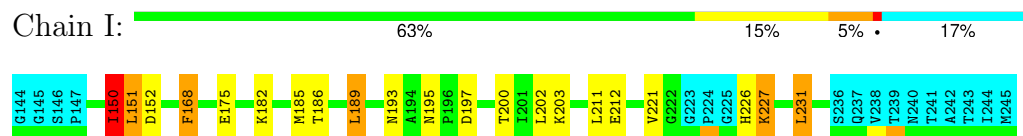
- Molecule 1: Capsid protein p24



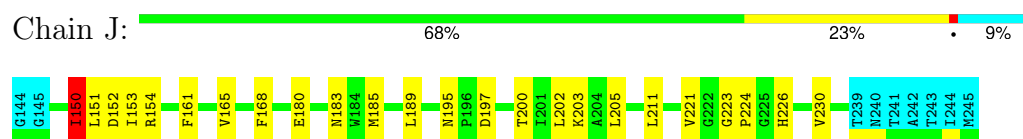
- Molecule 1: Capsid protein p24



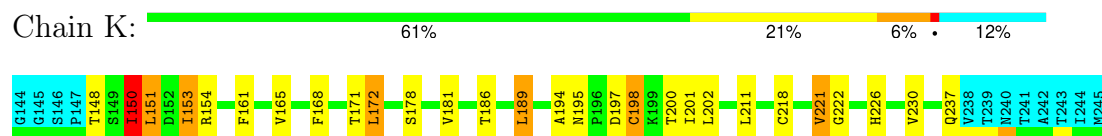
- Molecule 1: Capsid protein p24



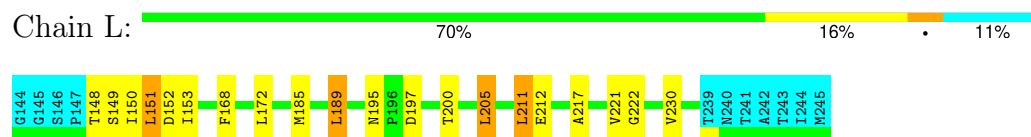
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

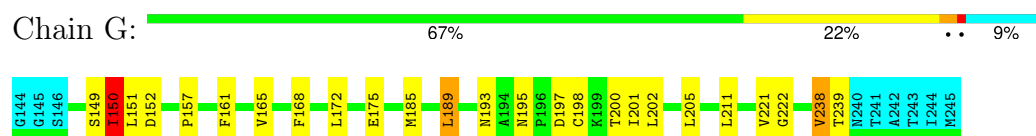


- Molecule 1: Capsid protein p24

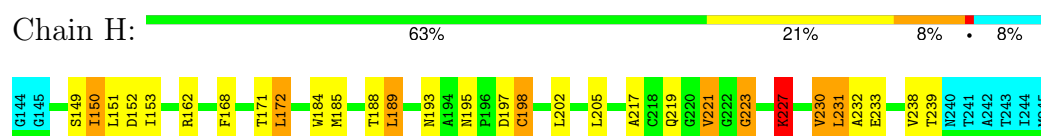


4.2.3 Score per residue for model 3

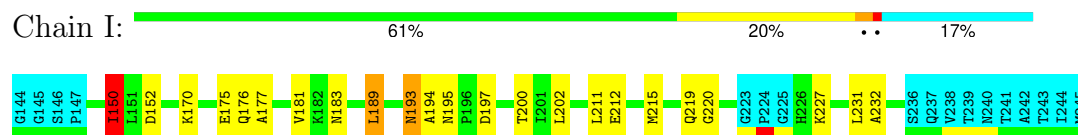
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24



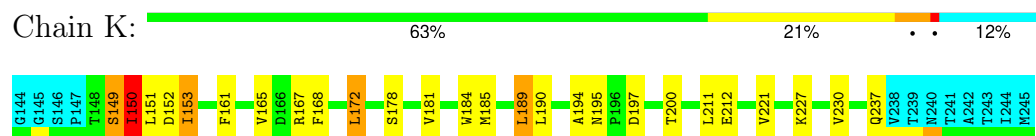
- Molecule 1: Capsid protein p24



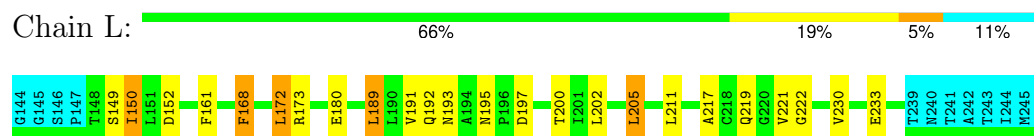
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

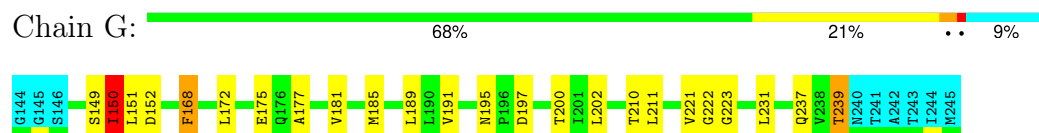


- Molecule 1: Capsid protein p24

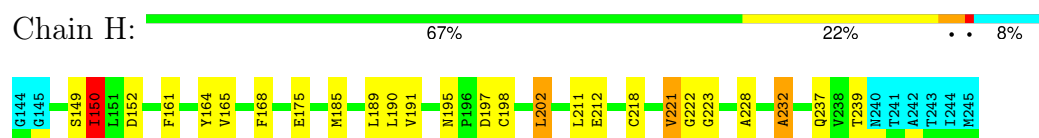


4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

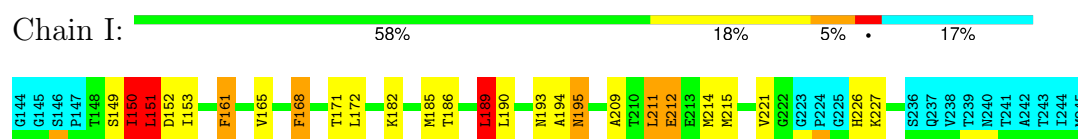
- Molecule 1: Capsid protein p24



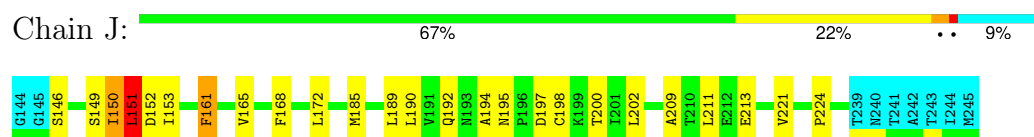
- Molecule 1: Capsid protein p24



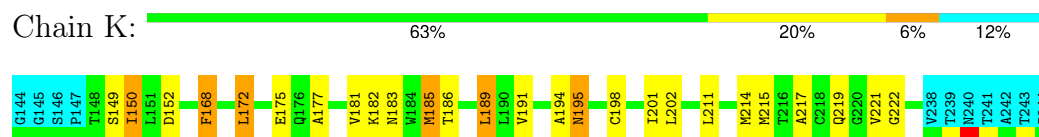
- Molecule 1: Capsid protein p24



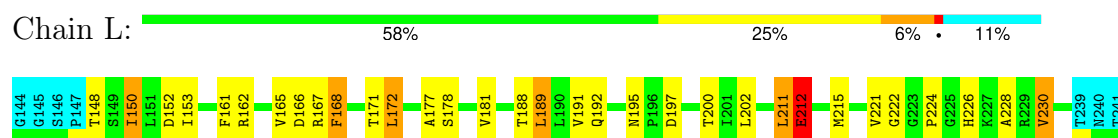
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24





4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G: 72% 16% 9%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H: 63% 22% 8% 8%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 58% 23% 17%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J: 67% 22% 9%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 57% 26% 5% 12%



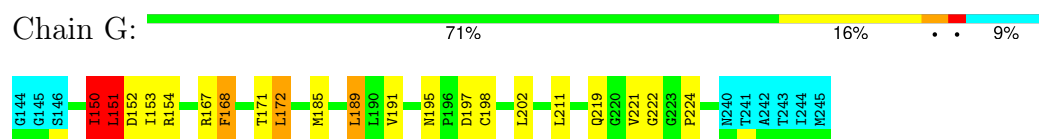
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L: 71% 13% 6% 11%

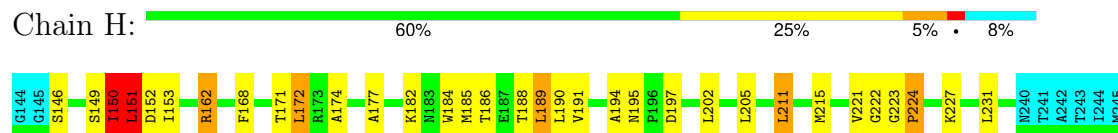


4.2.6 Score per residue for model 6

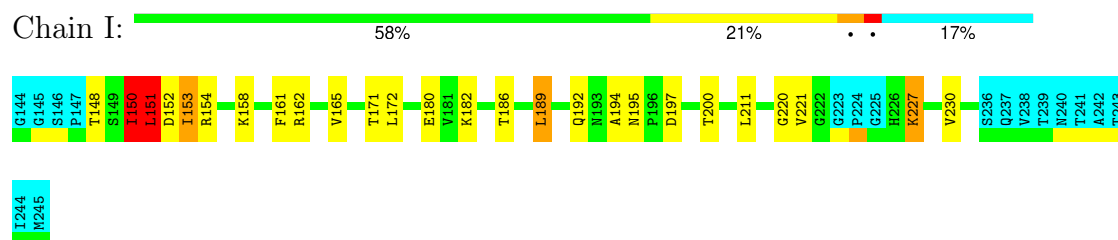
- Molecule 1: Capsid protein p24



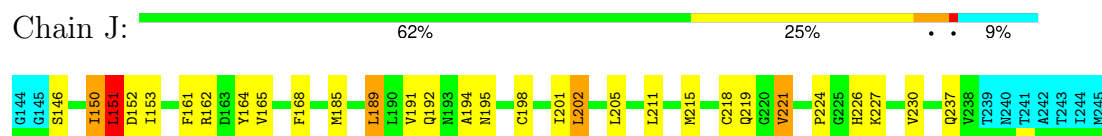
- Molecule 1: Capsid protein p24



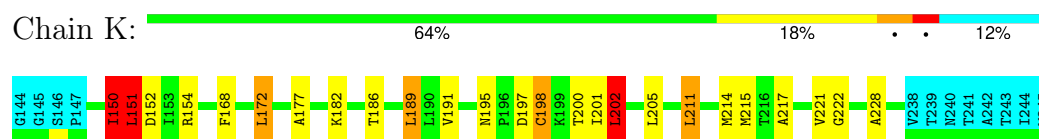
- Molecule 1: Capsid protein p24



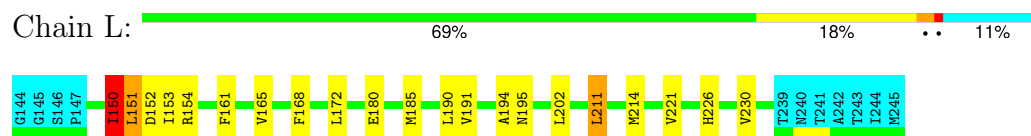
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24



4.2.7 Score per residue for model 7

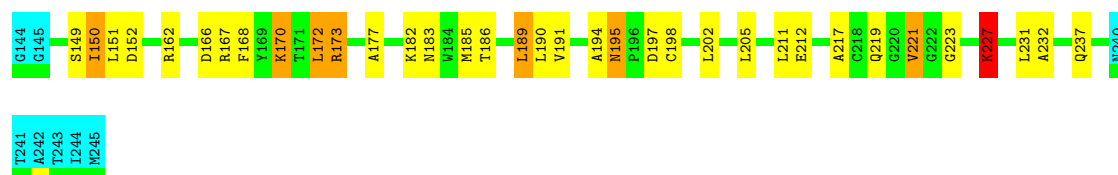
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G:  70% 20% 9%



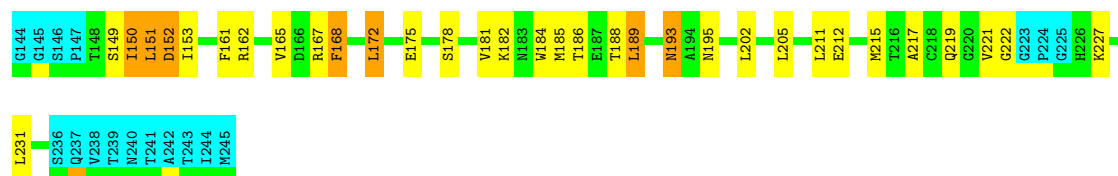
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H:  58% 26% 7% 8%



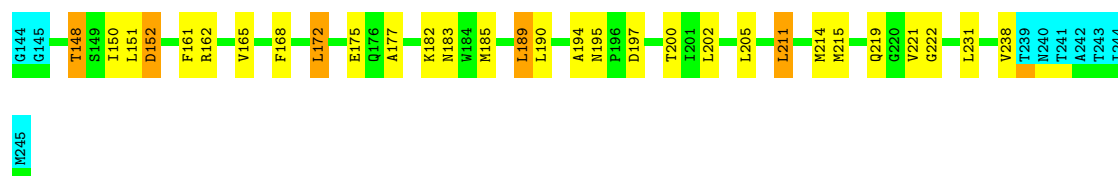
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I:  51% 25% 7% 17%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J:  62% 25% 5% 9%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K:  62% 25% 12%



- Molecule 1: Capsid protein p24

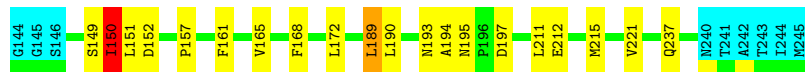
Chain L:  67% 18% 5% 11%



4.2.8 Score per residue for model 8

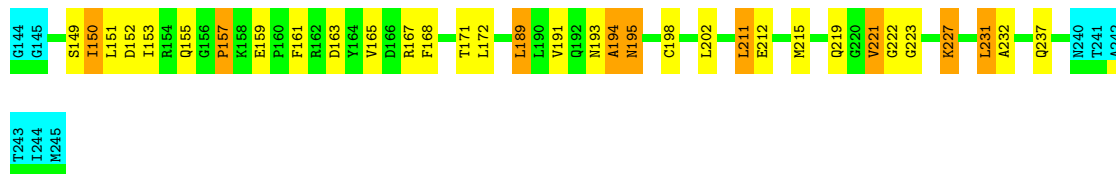
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G: 72% 18% 9%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H: 60% 24% 9% 8%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 59% 20% 17%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J: 67% 20% 5% 9%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 59% 23% 7% 12%



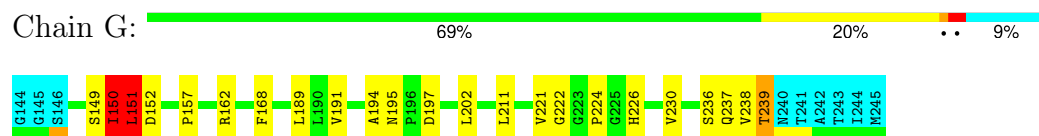
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L: 66% 19% 11%

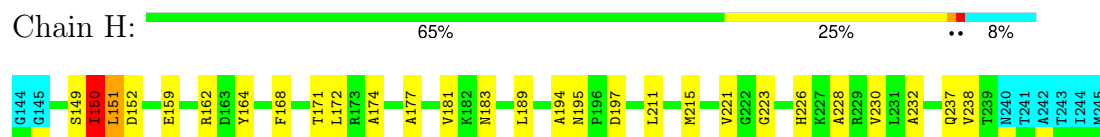


4.2.9 Score per residue for model 9

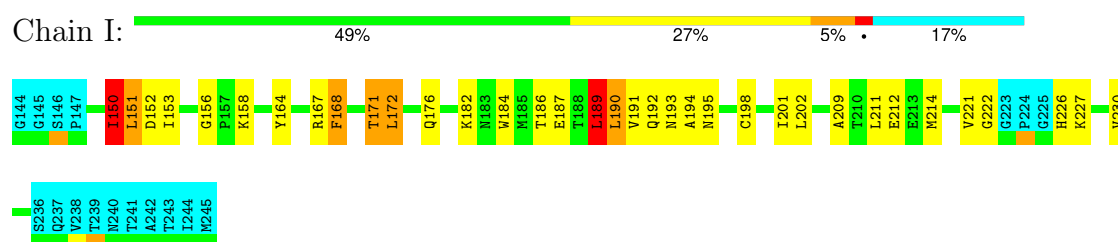
- Molecule 1: Capsid protein p24



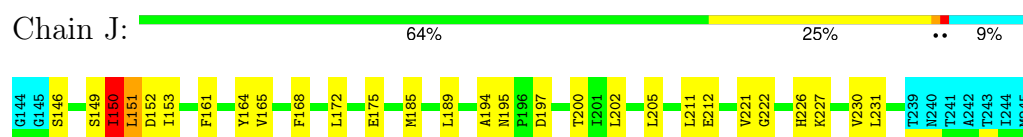
- Molecule 1: Capsid protein p24



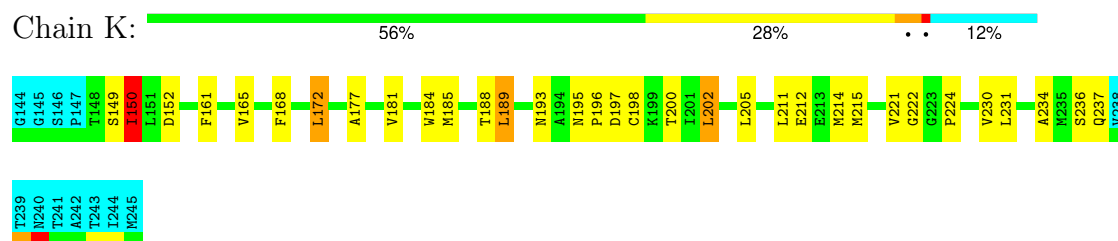
- Molecule 1: Capsid protein p24



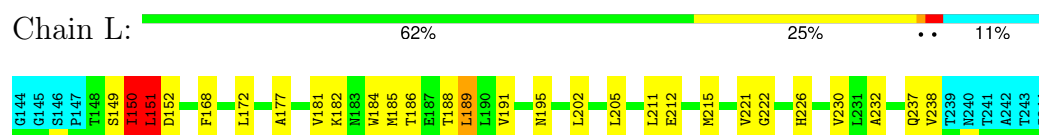
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24



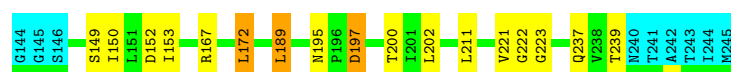
- Molecule 1: Capsid protein p24



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G: 



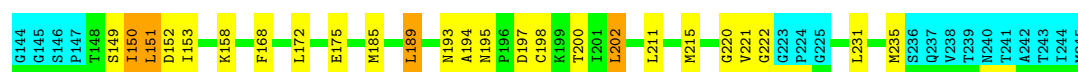
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H: 



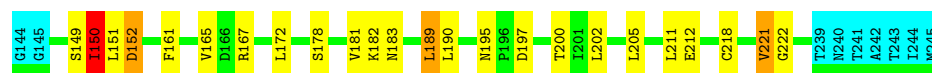
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 



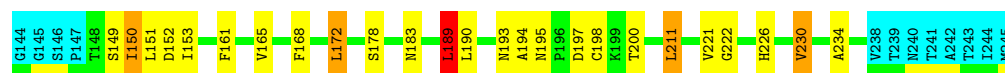
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J: 



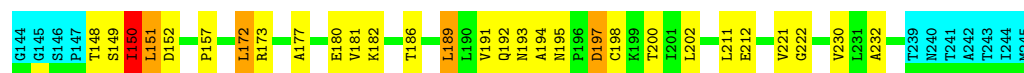
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L: 



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	structure calculation	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	516
Number of shifts mapped to atoms	516
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	6%

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: IHP, A1CCY

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	G	1.29±0.06	4±2/728 (0.5± 0.2%)	1.47±0.06	10±3/985 (1.0± 0.3%)
1	H	1.40±0.08	5±2/734 (0.7± 0.3%)	1.54±0.04	12±3/994 (1.2± 0.3%)
1	I	1.35±0.04	5±1/675 (0.7± 0.2%)	1.53±0.06	11±4/912 (1.2± 0.4%)
1	J	1.26±0.06	4±2/727 (0.5± 0.2%)	1.50±0.04	10±3/984 (1.0± 0.3%)
1	K	1.26±0.06	2±1/706 (0.3± 0.1%)	1.47±0.04	9±2/954 (1.0± 0.2%)
1	L	1.24±0.06	2±1/713 (0.4± 0.1%)	1.48±0.05	9±2/964 (1.0± 0.2%)
All	All	1.30	225/42830 (0.5%)	1.50	610/57930 (1.1%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	H	0.0±0.0	0.8±0.9
1	J	0.0±0.0	0.2±0.4
1	K	0.0±0.0	0.2±0.4
1	I	0.0±0.0	0.1±0.3
1	L	0.0±0.0	0.3±0.6
1	G	0.0±0.0	0.1±0.3
All	All	0	17

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	L	152	ASP	C-N	14.87	1.48	1.33	10	7
1	H	221	VAL	C-N	11.73	1.42	1.33	2	5
1	J	223	GLY	CA-C	10.24	1.58	1.51	8	2
1	J	152	ASP	N-CA	-9.96	1.38	1.47	2	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	H	223	GLY	C-N	-9.86	1.23	1.34	2	3
1	J	221	VAL	C-N	9.36	1.41	1.32	7	3
1	G	152	ASP	C-O	-8.70	1.14	1.24	2	1
1	K	151	LEU	CA-C	-8.66	1.41	1.53	2	1
1	I	152	ASP	N-CA	-8.55	1.35	1.46	6	4
1	I	152	ASP	C-N	8.44	1.41	1.33	1	4
1	J	152	ASP	C-N	8.28	1.41	1.33	8	2
1	I	227	LYS	N-CA	-8.26	1.35	1.46	7	4
1	G	150	ILE	C-N	-8.05	1.23	1.33	7	6
1	H	232	ALA	N-CA	-8.05	1.36	1.46	8	5
1	H	194	ALA	CA-C	7.88	1.60	1.53	5	3
1	K	152	ASP	C-N	7.84	1.41	1.33	9	3
1	J	151	LEU	CA-C	-7.76	1.45	1.52	1	4
1	H	221	VAL	N-CA	7.49	1.55	1.46	4	7
1	H	231	LEU	CA-C	-7.43	1.43	1.52	10	3
1	G	221	VAL	N-CA	7.41	1.54	1.46	6	6
1	H	221	VAL	CA-C	-7.39	1.43	1.52	5	5
1	I	221	VAL	CA-C	-7.27	1.43	1.52	8	3
1	H	152	ASP	C-N	7.23	1.41	1.33	5	3
1	K	152	ASP	N-CA	-7.17	1.36	1.46	6	2
1	I	226	HIS	CA-C	-6.97	1.43	1.52	4	2
1	G	152	ASP	N-CA	-6.97	1.35	1.46	2	4
1	G	151	LEU	CA-C	-6.90	1.44	1.52	2	4
1	I	190	LEU	N-CA	6.87	1.54	1.46	4	3
1	G	151	LEU	CA-CB	-6.79	1.42	1.53	8	3
1	I	176	GLN	CA-C	6.70	1.60	1.53	5	3
1	L	221	VAL	N-CA	6.69	1.54	1.46	4	4
1	G	223	GLY	C-N	-6.62	1.26	1.34	10	4
1	H	151	LEU	CA-C	-6.58	1.44	1.52	9	2
1	L	152	ASP	N-CA	-6.44	1.37	1.46	2	3
1	I	221	VAL	N-CA	6.43	1.54	1.46	2	3
1	H	195	ASN	N-CA	6.42	1.55	1.46	8	5
1	I	151	LEU	N-CA	-6.41	1.38	1.46	7	1
1	I	151	LEU	C-N	6.40	1.42	1.33	7	2
1	J	221	VAL	N-CA	6.34	1.54	1.46	6	2
1	I	151	LEU	CA-C	-6.29	1.44	1.53	6	3
1	H	227	LYS	CA-CB	6.25	1.63	1.53	8	2
1	H	152	ASP	N-CA	-6.18	1.36	1.46	6	1
1	H	152	ASP	C-O	-6.18	1.17	1.24	9	1
1	I	189	LEU	CA-C	6.12	1.58	1.53	4	2
1	I	150	ILE	C-N	-6.12	1.25	1.33	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	J	150	ILE	C-N	-6.07	1.25	1.33	9	3
1	H	232	ALA	CA-C	6.01	1.61	1.52	8	3
1	K	150	ILE	C-N	-6.01	1.26	1.33	1	2
1	G	221	VAL	C-N	6.00	1.39	1.32	6	3
1	J	152	ASP	C-O	-5.99	1.19	1.23	2	2
1	K	221	VAL	N-CA	5.99	1.53	1.46	3	4
1	H	223	GLY	CA-C	5.97	1.55	1.51	6	2
1	L	151	LEU	CA-C	-5.96	1.46	1.52	2	1
1	J	167	ARG	C-O	-5.94	1.16	1.24	10	1
1	K	198	CYS	C-O	-5.94	1.16	1.24	6	3
1	H	150	ILE	C-N	-5.93	1.25	1.33	1	2
1	I	219	GLN	N-CA	5.91	1.53	1.46	3	1
1	J	226	HIS	CA-C	5.87	1.58	1.53	5	1
1	I	150	ILE	CA-CB	5.86	1.62	1.54	9	2
1	L	221	VAL	C-N	5.84	1.40	1.32	4	2
1	I	221	VAL	C-N	5.83	1.40	1.33	8	1
1	J	148	THR	C-N	-5.82	1.26	1.33	7	1
1	I	222	GLY	C-N	-5.78	1.30	1.34	1	1
1	H	157	PRO	N-CA	5.76	1.54	1.47	5	1
1	G	168	PHE	C-O	-5.73	1.17	1.24	6	2
1	K	195	ASN	N-CA	5.72	1.54	1.46	8	3
1	I	222	GLY	CA-C	-5.67	1.43	1.51	5	2
1	G	237	GLN	C-N	-5.67	1.27	1.33	9	1
1	J	190	LEU	N-CA	5.65	1.53	1.46	10	2
1	L	168	PHE	C-O	-5.64	1.17	1.24	3	1
1	G	150	ILE	CA-CB	5.64	1.62	1.54	2	1
1	L	150	ILE	N-CA	5.63	1.53	1.46	9	2
1	L	150	ILE	C-N	-5.63	1.26	1.33	1	1
1	G	152	ASP	C-N	5.60	1.39	1.33	4	2
1	K	176	GLN	CA-CB	5.57	1.60	1.52	8	1
1	I	220	GLY	C-N	5.47	1.41	1.33	8	4
1	J	161	PHE	C-N	5.42	1.40	1.33	5	3
1	L	148	THR	N-CA	5.41	1.53	1.46	10	1
1	K	189	LEU	CA-C	5.40	1.60	1.52	10	1
1	K	150	ILE	CA-CB	5.28	1.61	1.54	6	1
1	K	153	ILE	CA-C	5.24	1.59	1.52	2	1
1	K	221	VAL	C-N	5.21	1.39	1.33	3	1
1	J	149	SER	C-O	-5.20	1.16	1.23	3	1
1	L	154	ARG	N-CA	5.19	1.52	1.45	6	1
1	K	223	GLY	C-N	-5.19	1.27	1.33	5	1
1	G	168	PHE	N-CA	-5.17	1.40	1.46	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	I	176	GLN	N-CA	5.13	1.53	1.46	9	1
1	L	151	LEU	CA-CB	-5.12	1.45	1.53	1	1
1	L	221	VAL	CA-C	-5.11	1.47	1.53	1	1
1	J	198	CYS	C-O	-5.11	1.17	1.24	4	1
1	G	150	ILE	N-CA	5.09	1.52	1.46	9	1
1	H	153	ILE	CA-C	5.07	1.58	1.52	6	1
1	G	223	GLY	CA-C	5.03	1.59	1.51	10	1
1	J	153	ILE	CA-C	5.02	1.58	1.53	1	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	L	222	GLY	N-CA-C	16.00	135.14	110.18	1	2
1	H	223	GLY	O-C-N	-12.89	116.43	121.07	6	5
1	I	222	GLY	N-CA-C	-12.12	94.42	111.76	10	3
1	J	152	ASP	N-CA-CB	-10.92	98.69	111.79	6	6
1	G	151	LEU	N-CA-C	-10.78	98.60	112.93	6	4
1	L	151	LEU	N-CA-C	-10.26	100.09	111.07	6	3
1	I	151	LEU	N-CA-C	-9.98	99.41	112.68	4	7
1	G	222	GLY	N-CA-C	9.85	124.19	111.09	6	2
1	H	227	LYS	CB-CA-C	9.65	126.03	110.88	2	5
1	H	221	VAL	CA-C-O	-9.59	110.97	121.23	3	7
1	J	223	GLY	O-C-N	-9.58	117.62	121.07	8	2
1	I	152	ASP	CA-C-O	-9.43	112.53	121.02	8	9
1	H	227	LYS	N-CA-CB	-9.35	96.32	110.16	5	2
1	J	151	LEU	N-CA-C	-9.28	100.58	112.93	6	7
1	K	152	ASP	N-CA-CB	-9.19	100.76	111.79	6	3
1	H	197	ASP	CA-CB-CG	-9.03	103.57	112.60	3	7
1	L	152	ASP	N-CA-CB	-8.99	101.00	111.79	9	4
1	H	222	GLY	CA-C-O	-8.96	116.39	122.22	6	3
1	L	221	VAL	CA-C-N	-8.81	107.73	121.03	1	6
1	L	221	VAL	C-N-CA	-8.81	107.73	121.03	1	6
1	G	197	ASP	CA-CB-CG	-8.76	103.84	112.60	6	7
1	H	223	GLY	N-CA-C	8.75	126.33	115.22	6	4
1	I	150	ILE	CA-C-O	8.75	131.72	120.78	6	4
1	G	221	VAL	CA-C-O	-8.41	111.44	121.28	9	8
1	H	152	ASP	CA-C-O	-8.40	113.46	121.02	2	6
1	H	215	MET	CB-CA-C	-8.36	96.75	110.79	2	1
1	H	227	LYS	CA-CB-CG	8.32	130.74	114.10	7	3
1	G	152	ASP	N-CA-CB	-8.27	100.07	111.65	6	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	K	221	VAL	CA-C-O	-8.27	113.87	121.97	2	6
1	G	152	ASP	CA-C-O	-8.25	112.62	121.20	2	7
1	K	151	LEU	N-CA-C	-8.21	100.21	112.04	2	3
1	L	221	VAL	CA-C-O	-8.15	113.08	122.13	1	4
1	I	152	ASP	CA-C-N	-8.13	112.21	122.37	7	7
1	I	152	ASP	C-N-CA	-8.13	112.21	122.37	7	7
1	K	152	ASP	CA-C-N	-7.90	110.24	120.98	4	9
1	K	152	ASP	C-N-CA	-7.90	110.24	120.98	4	9
1	L	152	ASP	CA-C-N	-7.87	112.51	122.43	4	8
1	L	152	ASP	C-N-CA	-7.87	112.51	122.43	4	8
1	L	151	LEU	CB-CA-C	-7.79	98.65	110.88	6	1
1	I	227	LYS	CB-CA-C	7.77	125.33	109.55	3	2
1	I	230	VAL	N-CA-C	7.68	117.75	110.53	8	3
1	G	152	ASP	CA-C-N	-7.65	109.71	121.18	1	10
1	G	152	ASP	C-N-CA	-7.65	109.71	121.18	1	10
1	I	222	GLY	CA-C-O	-7.63	114.00	122.24	10	4
1	H	152	ASP	N-CA-CB	-7.62	100.99	111.65	6	4
1	L	152	ASP	CA-C-O	-7.59	111.57	120.53	4	7
1	H	221	VAL	CA-C-N	-7.49	112.43	122.54	5	7
1	H	221	VAL	C-N-CA	-7.49	112.43	122.54	5	7
1	H	152	ASP	CA-C-N	-7.39	110.64	120.91	8	9
1	H	152	ASP	C-N-CA	-7.39	110.64	120.91	8	9
1	J	221	VAL	CA-C-O	-7.28	113.36	121.36	9	7
1	J	205	LEU	N-CA-C	-7.25	103.38	111.28	9	8
1	I	221	VAL	N-CA-C	-7.25	100.23	109.58	5	3
1	J	152	ASP	CA-C-O	-7.16	114.58	121.02	6	8
1	I	221	VAL	CA-C-O	-7.13	114.45	121.58	9	4
1	I	152	ASP	N-CA-CB	-7.11	98.48	110.49	6	6
1	I	222	GLY	O-C-N	7.11	131.94	122.70	5	2
1	J	168	PHE	CA-CB-CG	-7.08	106.72	113.80	3	1
1	K	194	ALA	N-CA-C	7.05	120.26	108.20	1	5
1	I	221	VAL	CA-C-N	-6.92	110.01	121.57	9	6
1	I	221	VAL	C-N-CA	-6.92	110.01	121.57	9	6
1	G	194	ALA	N-CA-C	6.91	118.28	108.54	9	1
1	I	184	TRP	N-CA-CB	-6.90	99.95	110.16	9	1
1	K	202	LEU	N-CA-C	-6.89	103.78	111.71	4	2
1	H	194	ALA	N-CA-C	6.89	118.26	108.54	10	2
1	I	227	LYS	N-CA-CB	-6.87	99.73	110.44	3	1
1	L	212	GLU	N-CA-C	-6.80	103.95	111.36	4	1
1	L	151	LEU	CA-C-O	-6.74	113.74	120.82	10	1
1	H	159	GLU	N-CA-C	6.73	118.13	109.72	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	J	221	VAL	CA-C-N	-6.68	113.67	122.63	7	5
1	J	221	VAL	C-N-CA	-6.68	113.67	122.63	7	5
1	J	221	VAL	N-CA-C	-6.66	100.39	109.37	5	4
1	L	197	ASP	CA-CB-CG	-6.62	105.98	112.60	5	2
1	L	154	ARG	N-CA-C	6.61	120.46	109.95	6	1
1	H	151	LEU	N-CA-C	-6.61	102.53	112.04	6	1
1	J	194	ALA	N-CA-C	6.60	120.00	109.24	4	5
1	H	149	SER	O-C-N	6.56	129.07	122.12	9	2
1	K	222	GLY	CA-C-N	-6.54	111.61	121.87	9	8
1	K	222	GLY	C-N-CA	-6.54	111.61	121.87	9	8
1	G	221	VAL	CA-C-N	-6.53	111.00	121.32	6	4
1	G	221	VAL	C-N-CA	-6.53	111.00	121.32	6	4
1	H	230	VAL	N-CA-C	6.50	122.87	109.34	3	1
1	K	188	THR	N-CA-C	6.49	118.15	111.14	1	1
1	L	194	ALA	N-CA-C	6.46	118.94	108.41	6	3
1	J	152	ASP	CA-C-N	-6.46	110.72	121.63	3	8
1	J	152	ASP	C-N-CA	-6.46	110.72	121.63	3	8
1	K	152	ASP	CA-C-O	-6.44	113.84	121.32	8	3
1	I	150	ILE	N-CA-C	6.40	117.49	112.12	3	1
1	L	205	LEU	N-CA-C	-6.25	104.47	111.28	8	5
1	I	192	GLN	N-CA-C	6.24	117.75	111.07	1	3
1	L	149	SER	O-C-N	6.21	128.80	122.09	9	1
1	K	227	LYS	N-CA-CB	6.21	119.08	110.07	3	1
1	G	150	ILE	CA-C-O	6.09	128.40	120.78	6	4
1	K	214	MET	N-CA-C	-6.09	104.55	111.07	6	4
1	H	149	SER	N-CA-C	6.07	119.08	111.24	1	2
1	I	149	SER	N-CA-C	6.06	120.74	112.68	8	2
1	L	233	GLU	N-CA-C	6.05	117.68	111.14	1	1
1	K	222	GLY	CA-C-O	-6.03	116.02	122.05	4	3
1	J	165	VAL	CB-CA-C	-6.02	104.17	111.88	3	1
1	K	149	SER	N-CA-C	5.92	118.22	111.11	3	2
1	K	197	ASP	CA-CB-CG	-5.91	106.69	112.60	8	1
1	L	222	GLY	CA-C-N	-5.89	112.61	121.87	9	7
1	L	222	GLY	C-N-CA	-5.89	112.61	121.87	9	7
1	G	150	ILE	CA-CB-CG2	5.89	120.51	110.50	4	3
1	L	188	THR	N-CA-C	5.86	117.34	111.07	4	3
1	G	205	LEU	N-CA-C	-5.85	104.90	111.28	1	4
1	H	162	ARG	N-CA-C	5.85	117.33	111.07	9	3
1	K	221	VAL	CA-C-N	-5.84	113.23	122.92	7	5
1	K	221	VAL	C-N-CA	-5.84	113.23	122.92	7	5
1	J	152	ASP	CA-CB-CG	-5.81	106.79	112.60	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	H	205	LEU	N-CA-C	-5.81	104.86	111.07	1	2
1	G	149	SER	N-CA-C	5.80	118.48	111.40	1	1
1	L	192	GLN	N-CA-C	5.80	117.40	111.14	10	3
1	I	219	GLN	CB-CA-C	-5.80	101.78	110.88	8	2
1	H	162	ARG	CB-CA-C	-5.78	102.06	110.96	10	1
1	H	231	LEU	CB-CA-C	-5.76	101.83	110.88	10	1
1	I	194	ALA	N-CA-C	5.75	118.26	108.02	6	7
1	L	238	VAL	CA-C-N	5.72	132.46	121.54	5	1
1	L	238	VAL	C-N-CA	5.72	132.46	121.54	5	1
1	I	158	LYS	N-CA-C	-5.71	106.48	113.50	9	4
1	L	221	VAL	N-CA-C	-5.70	103.77	110.21	1	1
1	K	221	VAL	N-CA-C	-5.66	101.48	109.63	4	1
1	H	149	SER	CA-C-O	-5.66	114.55	120.55	9	1
1	G	222	GLY	CA-C-O	-5.65	117.53	122.16	1	2
1	H	231	LEU	O-C-N	5.65	127.89	122.07	10	1
1	K	151	LEU	CB-CA-C	-5.64	102.03	110.88	7	1
1	J	151	LEU	CB-CA-C	-5.62	101.12	110.68	3	1
1	J	151	LEU	CA-C-O	-5.62	114.91	120.82	10	1
1	K	153	ILE	N-CA-C	-5.62	102.27	109.30	3	1
1	H	170	LYS	N-CA-CB	5.62	118.22	110.07	7	1
1	G	222	GLY	CA-C-N	-5.59	113.09	121.87	1	9
1	G	222	GLY	C-N-CA	-5.59	113.09	121.87	1	9
1	H	224	PRO	N-CD-CG	-5.59	94.82	103.20	6	2
1	J	192	GLN	N-CA-C	5.55	117.33	111.28	1	3
1	K	227	LYS	CB-CA-C	-5.54	102.15	110.90	3	1
1	J	150	ILE	CA-CB-CG2	5.53	119.91	110.50	9	1
1	H	229	ARG	N-CA-C	5.53	120.03	113.12	2	2
1	H	215	MET	N-CA-C	5.53	116.98	111.07	8	1
1	G	239	THR	N-CA-C	5.50	117.08	111.14	10	1
1	I	220	GLY	N-CA-C	-5.49	107.51	114.16	6	3
1	L	157	PRO	N-CA-C	-5.47	106.07	113.40	10	1
1	I	154	ARG	N-CA-C	5.46	119.14	109.96	6	1
1	H	150	ILE	CA-C-O	5.46	127.60	120.78	6	3
1	G	150	ILE	N-CA-CB	5.45	120.23	111.23	2	1
1	L	168	PHE	CA-CB-CG	-5.43	108.37	113.80	3	1
1	I	222	GLY	CA-C-N	-5.42	113.35	121.87	1	1
1	I	222	GLY	C-N-CA	-5.42	113.35	121.87	1	1
1	K	181	VAL	CA-C-O	-5.42	115.77	121.41	7	1
1	I	201	ILE	CB-CA-C	-5.41	104.93	112.02	9	1
1	I	168	PHE	CA-CB-CG	-5.35	108.45	113.80	1	1
1	J	238	VAL	CA-C-N	5.29	131.65	121.54	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	J	238	VAL	C-N-CA	5.29	131.65	121.54	5	2
1	I	161	PHE	CA-CB-CG	-5.29	108.50	113.80	4	1
1	K	193	ASN	CA-CB-CG	-5.29	107.31	112.60	10	1
1	K	150	ILE	CA-CB-CG2	5.27	119.47	110.50	3	1
1	J	201	ILE	CB-CA-C	-5.26	104.24	111.65	3	1
1	G	150	ILE	O-C-N	-5.24	116.03	122.57	9	1
1	I	187	GLU	N-CA-C	5.22	117.05	111.36	9	1
1	H	202	LEU	N-CA-C	-5.21	105.60	111.28	4	1
1	H	157	PRO	N-CA-CB	-5.21	97.78	103.25	8	1
1	H	172	LEU	N-CA-C	-5.21	105.69	111.36	6	1
1	K	237	GLN	N-CA-CB	5.20	118.01	110.26	5	1
1	I	150	ILE	CA-CB-CG2	5.20	119.33	110.50	8	1
1	H	222	GLY	N-CA-C	5.19	117.36	111.85	2	1
1	H	168	PHE	CA-CB-CG	-5.19	108.61	113.80	1	1
1	K	191	VAL	N-CA-C	5.18	115.40	110.53	4	1
1	L	153	ILE	N-CA-C	5.18	116.09	109.30	2	1
1	G	172	LEU	CB-CA-C	-5.18	102.19	110.79	6	1
1	J	222	GLY	CA-C-N	-5.18	113.74	121.87	7	3
1	J	222	GLY	C-N-CA	-5.18	113.74	121.87	7	3
1	L	150	ILE	CA-CB-CG2	5.17	119.29	110.50	1	1
1	K	203	LYS	N-CA-CB	5.16	117.80	110.16	8	1
1	K	184	TRP	N-CA-CB	-5.16	102.28	110.22	3	1
1	K	150	ILE	CB-CA-C	5.14	115.79	110.70	10	3
1	K	153	ILE	CB-CA-C	5.14	116.95	111.35	10	1
1	L	149	SER	N-CA-C	5.13	116.68	111.14	9	1
1	H	227	LYS	CB-CG-CD	5.13	123.09	111.30	2	1
1	H	232	ALA	N-CA-C	-5.10	105.73	111.28	4	1
1	I	156	GLY	CA-C-N	5.09	124.78	119.64	9	1
1	I	156	GLY	C-N-CA	5.09	124.78	119.64	9	1
1	G	221	VAL	N-CA-C	-5.08	102.65	109.30	4	1
1	I	150	ILE	CB-CA-C	5.08	119.61	111.29	4	1
1	G	151	LEU	CB-CA-C	-5.07	102.12	110.08	6	1
1	J	188	THR	N-CA-C	5.05	116.48	111.07	1	1
1	L	161	PHE	CA-CB-CG	-5.05	108.75	113.80	3	1
1	L	166	ASP	N-CA-C	-5.05	105.86	111.36	4	1
1	G	151	LEU	N-CA-CB	5.04	119.11	110.34	6	1
1	H	227	LYS	CG-CD-CE	5.04	122.88	111.30	8	1
1	I	172	LEU	N-CA-CB	5.03	117.51	110.12	6	1
1	J	154	ARG	N-CA-C	5.03	116.50	108.41	2	1
1	K	181	VAL	N-CA-CB	5.03	116.43	110.55	8	1
1	H	228	ALA	N-CA-C	-5.02	105.94	111.71	1	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	H	162	ARG	Sidechain	4
1	H	167	ARG	Sidechain	3
1	L	154	ARG	Sidechain	2
1	J	162	ARG	Sidechain	1
1	K	154	ARG	Sidechain	1
1	H	173	ARG	Sidechain	1
1	I	162	ARG	Sidechain	1
1	L	162	ARG	Sidechain	1
1	J	173	ARG	Sidechain	1
1	K	162	ARG	Sidechain	1
1	G	162	ARG	Sidechain	1

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	G	715	720	720	8±2
1	H	721	725	725	13±4
1	I	664	671	671	10±3
1	J	714	718	718	10±4
1	K	694	697	697	16±4
1	L	701	706	706	13±5
3	H	33	29	0	1±1
All	All	42780	42720	42430	664

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 8.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:L:150:ILE:HG23	1:L:189:LEU:HD22	0.93	1.36	2	3
1:L:150:ILE:HD11	1:L:172:LEU:HD22	0.88	1.40	2	2
1:K:234:ALA:HB1	1:L:232:ALA:HB2	0.81	1.53	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:I:150:ILE:HD13	1:I:172:LEU:HD21	0.77	1.56	5	4
1:I:153:ILE:HD13	1:I:171:THR:HG21	0.72	1.61	1	4
1:J:161:PHE:O	1:J:165:VAL:HG23	0.70	1.87	6	10
1:I:150:ILE:HG23	1:I:189:LEU:HD22	0.70	1.61	6	6
1:L:197:ASP:O	1:L:200:THR:HG22	0.70	1.87	4	7
1:K:150:ILE:HD13	1:K:172:LEU:CD2	0.70	2.17	2	1
1:K:149:SER:O	1:K:150:ILE:HD12	0.69	1.87	4	7
1:G:189:LEU:HD21	1:G:193:ASN:HD21	0.69	1.45	7	1
1:I:182:LYS:O	1:I:186:THR:HG23	0.69	1.87	9	5
1:G:149:SER:O	1:G:150:ILE:HD12	0.69	1.86	3	6
1:K:150:ILE:HG23	1:K:189:LEU:HD13	0.68	1.64	5	8
1:J:149:SER:O	1:J:150:ILE:HD12	0.68	1.87	8	6
1:K:190:LEU:O	1:K:194:ALA:HB2	0.68	1.88	8	3
1:L:191:VAL:HG22	1:L:202:LEU:HD23	0.68	1.64	9	5
1:J:197:ASP:O	1:J:200:THR:HG22	0.68	1.87	3	8
1:G:191:VAL:HG22	1:G:202:LEU:HD23	0.68	1.65	4	6
1:I:226:HIS:CE1	1:I:230:VAL:HG21	0.68	2.24	9	1
1:I:175:GLU:OE1	1:I:185:MET:HE1	0.67	1.89	2	3
1:J:150:ILE:HD13	1:J:172:LEU:CD2	0.67	2.19	9	4
1:K:149:SER:C	1:K:150:ILE:HD12	0.66	2.16	1	4
1:I:172:LEU:HD13	1:I:175:GLU:OE2	0.66	1.90	7	1
1:K:150:ILE:HD13	1:K:185:MET:CE	0.66	2.20	9	2
1:H:153:ILE:HD13	1:H:171:THR:HG21	0.66	1.67	1	5
1:I:150:ILE:HD13	1:I:172:LEU:CD2	0.65	2.21	4	4
1:J:150:ILE:HD13	1:J:172:LEU:HD21	0.65	1.68	9	4
1:H:231:LEU:HD11	1:I:232:ALA:HB2	0.65	1.67	3	1
1:H:149:SER:C	1:H:150:ILE:HD12	0.65	2.17	2	1
1:L:168:PHE:O	1:L:172:LEU:HD23	0.64	1.92	1	6
1:K:197:ASP:O	1:K:200:THR:HG22	0.64	1.93	3	8
1:J:226:HIS:O	1:J:230:VAL:HG23	0.64	1.92	6	5
1:L:161:PHE:O	1:L:165:VAL:HG23	0.64	1.92	6	2
1:L:189:LEU:HD21	1:L:193:ASN:ND2	0.64	2.08	10	3
1:L:149:SER:C	1:L:150:ILE:HD12	0.64	2.17	2	2
1:I:149:SER:O	1:I:150:ILE:HD12	0.63	1.93	1	2
1:K:172:LEU:HD12	1:K:186:THR:HG23	0.63	1.70	4	2
1:G:150:ILE:HG23	1:G:189:LEU:HD13	0.63	1.69	10	6
1:J:212:GLU:OE1	1:J:215:MET:HE2	0.63	1.93	8	1
1:K:184:TRP:CH2	1:K:188:THR:HG21	0.62	2.30	9	1
1:L:189:LEU:HD21	1:L:193:ASN:HD21	0.62	1.54	10	2
1:I:150:ILE:HG22	1:I:185:MET:HE2	0.62	1.72	8	1
1:L:205:LEU:HD11	1:L:217:ALA:CB	0.61	2.25	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:K:150:ILE:HD13	1:K:185:MET:HE3	0.61	1.70	4	3
1:I:197:ASP:O	1:I:200:THR:HG22	0.61	1.94	3	4
1:J:150:ILE:HG23	1:J:189:LEU:HD22	0.61	1.71	7	3
1:K:234:ALA:HB1	1:L:232:ALA:CB	0.61	2.24	9	3
1:K:150:ILE:HD11	1:K:172:LEU:HD21	0.61	1.72	1	6
1:K:226:HIS:O	1:K:230:VAL:HG23	0.61	1.95	1	2
1:G:150:ILE:HD13	1:G:172:LEU:CD2	0.61	2.25	2	1
1:H:226:HIS:CE1	1:H:230:VAL:HG21	0.60	2.31	1	2
1:K:198:CYS:O	1:K:202:LEU:HD12	0.60	1.96	9	3
1:L:191:VAL:HG22	1:L:202:LEU:CD2	0.60	2.25	9	1
1:H:198:CYS:CB	1:H:221:VAL:HG21	0.60	2.26	5	8
1:J:175:GLU:OE1	1:J:185:MET:HE1	0.60	1.97	3	2
1:G:189:LEU:HD21	1:G:193:ASN:ND2	0.60	2.12	7	1
1:H:146:SER:O	1:H:151:LEU:HD11	0.59	1.97	6	1
1:I:209:ALA:O	1:I:214:MET:HE3	0.59	1.96	4	3
1:J:231:LEU:HD13	1:K:231:LEU:HD23	0.59	1.75	9	1
1:H:198:CYS:HB3	1:H:221:VAL:HG21	0.59	1.74	4	7
1:K:161:PHE:O	1:K:165:VAL:HG23	0.59	1.98	7	6
1:K:209:ALA:HB1	1:K:213:GLU:HB2	0.59	1.73	5	2
1:K:172:LEU:HD23	1:K:186:THR:HG22	0.59	1.75	6	1
1:K:205:LEU:HD11	1:K:217:ALA:CB	0.58	2.28	6	2
1:J:150:ILE:HD11	1:J:168:PHE:CE2	0.58	2.34	8	1
1:L:168:PHE:CE1	1:L:172:LEU:HD21	0.58	2.33	2	1
1:J:146:SER:OG	1:J:185:MET:HE1	0.58	1.99	1	1
1:L:150:ILE:HG21	1:L:185:MET:HB3	0.57	1.75	2	2
1:L:150:ILE:HG23	1:L:189:LEU:HD13	0.57	1.75	3	7
1:G:197:ASP:O	1:G:200:THR:HG22	0.57	2.00	4	4
1:J:165:VAL:HG22	1:J:190:LEU:HD11	0.57	1.76	7	1
1:K:150:ILE:HD13	1:K:172:LEU:HD21	0.57	1.75	2	1
1:J:150:ILE:HG21	1:J:185:MET:HB3	0.57	1.77	2	2
1:L:150:ILE:CD1	1:L:172:LEU:HD21	0.56	2.30	7	5
1:J:150:ILE:HD11	1:J:172:LEU:HD22	0.56	1.75	7	1
1:J:162:ARG:NH2	1:J:211:LEU:HD12	0.56	2.15	7	1
1:H:184:TRP:CH2	1:H:188:THR:HG21	0.56	2.36	3	2
1:H:149:SER:O	1:H:150:ILE:HD12	0.56	2.01	2	8
1:H:161:PHE:O	1:H:165:VAL:HG23	0.56	2.01	8	3
1:I:168:PHE:CE1	1:I:186:THR:HG22	0.56	2.35	9	3
1:H:218:CYS:O	1:H:221:VAL:HG23	0.56	2.01	4	1
1:J:150:ILE:HB	1:J:185:MET:HE2	0.56	1.77	9	2
1:G:191:VAL:HG22	1:G:202:LEU:CD2	0.56	2.30	6	2
1:K:177:ALA:HB1	1:K:181:VAL:CG1	0.56	2.31	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:L:205:LEU:HD11	1:L:217:ALA:HB3	0.56	1.77	2	4
1:J:148:THR:N	1:J:151:LEU:HD11	0.55	2.16	1	1
1:G:150:ILE:HD13	1:G:172:LEU:HD23	0.55	1.78	2	1
1:I:191:VAL:HG22	1:I:202:LEU:HD23	0.55	1.78	5	2
1:K:150:ILE:HG23	1:K:189:LEU:HD22	0.55	1.77	2	2
1:G:198:CYS:O	1:G:202:LEU:HD13	0.55	2.00	1	2
1:G:151:LEU:H	1:G:151:LEU:HD12	0.55	1.62	6	2
1:L:182:LYS:O	1:L:186:THR:HG23	0.55	2.02	9	2
1:K:172:LEU:CD2	1:K:186:THR:HG22	0.55	2.31	6	1
1:L:226:HIS:O	1:L:230:VAL:HG23	0.55	2.02	6	4
1:L:150:ILE:HG22	1:L:185:MET:HE2	0.55	1.79	6	1
1:L:150:ILE:HG23	1:L:189:LEU:CD2	0.55	2.22	2	2
1:J:150:ILE:HG23	1:J:189:LEU:CB	0.55	2.32	6	1
1:I:150:ILE:CD1	1:I:172:LEU:HD21	0.55	2.32	1	2
1:K:218:CYS:O	1:K:221:VAL:HG23	0.55	2.02	2	1
1:J:153:ILE:HG21	1:J:168:PHE:HA	0.54	1.78	6	2
1:H:198:CYS:O	1:H:202:LEU:HD12	0.54	2.02	5	1
1:G:153:ILE:HD13	1:G:171:THR:HG21	0.54	1.79	6	1
1:H:227:LYS:HB3	3:H:302:A1CCY:C28	0.54	2.33	1	1
1:I:150:ILE:HD11	1:I:168:PHE:CZ	0.54	2.37	1	1
1:K:226:HIS:O	1:K:230:VAL:HG22	0.54	2.03	5	3
1:L:150:ILE:HG13	1:L:189:LEU:HD22	0.54	1.79	10	3
1:I:150:ILE:CD1	1:I:171:THR:HG23	0.54	2.32	6	1
1:J:177:ALA:HB1	1:J:181:VAL:CG1	0.54	2.33	1	1
1:K:165:VAL:HG22	1:K:190:LEU:HD11	0.54	1.80	10	3
1:J:146:SER:O	1:J:151:LEU:HD11	0.54	2.03	9	4
1:G:177:ALA:HB1	1:G:181:VAL:CG1	0.54	2.33	4	1
1:K:151:LEU:H	1:K:151:LEU:HD12	0.53	1.63	6	1
1:J:153:ILE:HG21	1:J:168:PHE:CB	0.53	2.33	4	4
1:K:150:ILE:HG21	1:K:185:MET:HB3	0.53	1.81	7	1
1:I:150:ILE:HD13	1:I:185:MET:SD	0.53	2.43	7	1
1:L:177:ALA:HB3	1:L:182:LYS:CG	0.53	2.33	1	1
1:K:205:LEU:HD11	1:K:217:ALA:HB3	0.53	1.80	6	2
1:H:150:ILE:HG13	1:H:189:LEU:HD22	0.53	1.79	10	1
1:K:177:ALA:HB3	1:K:182:LYS:CG	0.53	2.34	4	2
1:H:150:ILE:HD13	1:H:175:GLU:OE1	0.53	2.02	2	1
1:I:161:PHE:O	1:I:165:VAL:HG23	0.53	2.03	8	4
1:H:211:LEU:HD13	1:H:211:LEU:O	0.53	2.03	1	3
1:G:150:ILE:HG21	1:G:185:MET:HB3	0.53	1.80	6	2
1:I:151:LEU:HD12	1:I:151:LEU:H	0.53	1.63	6	1
1:I:198:CYS:O	1:I:202:LEU:HD13	0.53	2.03	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:K:153:ILE:HD13	1:K:171:THR:HG21	0.53	1.81	5	1
1:K:211:LEU:HD13	1:K:211:LEU:O	0.52	2.04	10	3
1:J:172:LEU:HD13	1:J:182:LYS:HB3	0.52	1.80	10	1
1:L:150:ILE:HD13	1:L:172:LEU:HD21	0.52	1.79	8	3
1:H:150:ILE:HD11	1:H:168:PHE:CZ	0.52	2.40	1	2
1:G:175:GLU:OE1	1:G:185:MET:HE1	0.52	2.04	2	4
1:I:189:LEU:HD21	1:I:193:ASN:ND2	0.52	2.20	4	2
1:J:226:HIS:CE1	1:J:230:VAL:HG21	0.51	2.40	6	1
1:H:190:LEU:O	1:H:194:ALA:HB2	0.51	2.06	5	4
1:K:150:ILE:CG2	1:K:189:LEU:HD13	0.51	2.35	8	3
1:H:198:CYS:CA	1:H:221:VAL:HG21	0.51	2.35	2	3
1:H:205:LEU:HD11	1:H:217:ALA:HB3	0.51	1.81	3	2
1:L:184:TRP:CH2	1:L:188:THR:HG21	0.51	2.40	9	1
1:G:150:ILE:HB	1:G:185:MET:HE2	0.51	1.81	3	4
1:H:150:ILE:HD11	1:H:172:LEU:HA	0.51	1.81	2	1
1:K:177:ALA:HB3	1:K:182:LYS:HG2	0.51	1.82	6	1
1:K:178:SER:HB2	1:K:181:VAL:HG23	0.51	1.83	2	2
1:H:153:ILE:HD11	1:H:167:ARG:HB3	0.51	1.83	1	1
1:G:167:ARG:O	1:G:171:THR:HG22	0.50	2.05	6	1
1:G:161:PHE:O	1:G:165:VAL:HG23	0.50	2.06	5	5
1:J:209:ALA:HB1	1:J:213:GLU:HB2	0.50	1.83	4	1
1:G:150:ILE:HD11	1:G:168:PHE:CZ	0.50	2.41	8	2
1:H:198:CYS:HA	1:H:201:ILE:HD12	0.50	1.83	1	1
1:H:150:ILE:HD11	1:H:168:PHE:CE2	0.50	2.41	3	1
1:K:153:ILE:HG21	1:K:168:PHE:CD1	0.50	2.42	3	2
1:H:223:GLY:HA2	1:H:227:LYS:HG3	0.50	1.82	3	1
1:H:155:GLN:NE2	1:H:194:ALA:HB1	0.50	2.22	8	1
1:H:231:LEU:HD23	1:H:232:ALA:HA	0.50	1.83	10	1
1:H:164:TYR:CE2	1:H:190:LEU:HD12	0.50	2.42	1	2
1:K:150:ILE:CD1	1:K:172:LEU:HD21	0.50	2.36	3	5
1:L:149:SER:O	1:L:150:ILE:HD13	0.50	2.07	8	2
1:H:150:ILE:HG23	1:H:189:LEU:HD13	0.50	1.83	4	7
1:K:150:ILE:CG1	1:K:189:LEU:HD22	0.50	2.37	2	1
1:H:231:LEU:CD1	1:I:231:LEU:HD22	0.50	2.37	10	1
1:L:211:LEU:O	1:L:211:LEU:HD13	0.49	2.07	6	2
1:J:150:ILE:HG23	1:J:189:LEU:HD13	0.49	1.84	10	1
1:K:168:PHE:O	1:K:172:LEU:HD23	0.49	2.07	8	6
1:L:150:ILE:CG2	1:L:189:LEU:HD13	0.49	2.37	1	1
1:K:184:TRP:CZ2	1:K:188:THR:HG21	0.49	2.42	8	1
1:K:191:VAL:HG13	1:K:202:LEU:HD22	0.49	1.83	6	1
1:L:198:CYS:O	1:L:202:LEU:HD13	0.49	2.07	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:L:191:VAL:HG22	1:L:202:LEU:HD22	0.49	1.84	1	1
1:H:150:ILE:HB	1:H:185:MET:HE2	0.49	1.84	4	1
1:H:189:LEU:HD21	1:H:193:ASN:HD21	0.49	1.67	8	1
1:L:161:PHE:CZ	1:L:165:VAL:HG21	0.49	2.42	4	1
1:K:153:ILE:HD11	1:K:167:ARG:HB3	0.49	1.85	1	2
1:H:150:ILE:CD1	1:H:172:LEU:HD21	0.49	2.37	7	3
1:L:149:SER:CB	1:L:150:ILE:HD12	0.49	2.38	1	1
1:K:201:ILE:HD13	1:K:217:ALA:O	0.49	2.08	6	1
1:K:161:PHE:CE1	1:K:202:LEU:HD11	0.49	2.43	9	1
1:L:153:ILE:HG21	1:L:168:PHE:HA	0.48	1.85	6	1
1:K:201:ILE:CG2	1:K:217:ALA:HB1	0.48	2.38	1	3
1:G:236:SER:O	1:G:239:THR:HG22	0.48	2.07	9	2
1:L:224:PRO:O	1:L:228:ALA:HB2	0.48	2.07	1	2
1:I:168:PHE:HE1	1:I:186:THR:HG22	0.48	1.67	9	2
1:H:228:ALA:O	1:H:232:ALA:HB3	0.48	2.07	9	3
1:K:175:GLU:OE2	1:K:177:ALA:HB2	0.48	2.08	4	1
1:I:201:ILE:HD12	1:I:221:VAL:CG2	0.48	2.38	8	1
1:L:168:PHE:CD1	1:L:172:LEU:HD21	0.48	2.43	2	1
1:I:150:ILE:CG2	1:I:189:LEU:HD22	0.48	2.37	6	1
1:I:161:PHE:CE2	1:I:165:VAL:HG21	0.48	2.44	8	1
1:I:231:LEU:HD21	1:I:235:MET:HG3	0.48	1.84	10	1
1:H:150:ILE:HG12	1:H:185:MET:HE2	0.48	1.86	7	1
1:J:230:VAL:HG11	1:K:224:PRO:O	0.48	2.09	9	1
1:J:175:GLU:OE2	1:J:185:MET:HE1	0.48	2.09	7	1
1:K:164:TYR:CE2	1:K:194:ALA:HB2	0.47	2.44	1	1
1:H:191:VAL:HG22	1:H:202:LEU:HD23	0.47	1.86	10	4
1:G:150:ILE:HG23	1:G:189:LEU:CB	0.47	2.39	6	1
1:G:231:LEU:HD13	3:H:302:A1CCY:C21	0.47	2.39	1	2
1:I:153:ILE:HD11	1:I:167:ARG:HB3	0.47	1.85	1	1
1:L:150:ILE:HG23	1:L:189:LEU:CD1	0.47	2.39	1	1
1:I:153:ILE:CD1	1:I:171:THR:HG21	0.47	2.40	6	1
1:K:215:MET:HE2	1:K:219:GLN:HG3	0.47	1.86	1	2
1:L:167:ARG:O	1:L:171:THR:HG22	0.47	2.10	4	1
1:L:172:LEU:CD1	1:L:186:THR:HG22	0.47	2.38	9	1
1:J:150:ILE:HG21	1:J:185:MET:CG	0.47	2.39	1	1
1:H:231:LEU:HD12	1:I:231:LEU:HD22	0.47	1.86	10	1
1:L:201:ILE:HD12	1:L:218:CYS:HA	0.46	1.87	5	1
1:J:164:TYR:CE2	1:J:194:ALA:HB2	0.46	2.45	6	3
1:H:235:MET:HE1	1:I:235:MET:HE2	0.46	1.87	1	1
1:H:151:LEU:HD12	1:H:151:LEU:H	0.46	1.70	6	1
1:G:150:ILE:HD11	1:G:172:LEU:HD21	0.46	1.88	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:L:175:GLU:CD	1:L:185:MET:HE1	0.46	2.35	1	1
1:G:198:CYS:HA	1:G:201:ILE:HD12	0.46	1.88	3	1
1:I:153:ILE:HG21	1:I:168:PHE:HB2	0.46	1.87	9	2
1:H:150:ILE:HG23	1:H:189:LEU:HD22	0.46	1.87	6	1
1:L:149:SER:O	1:L:150:ILE:HD12	0.46	2.10	3	2
1:I:211:LEU:HD22	1:I:214:MET:SD	0.46	2.51	4	1
1:L:150:ILE:HD12	1:L:172:LEU:HD21	0.46	1.88	4	1
1:L:212:GLU:OE2	1:L:215:MET:HE2	0.46	2.11	4	1
1:J:154:ARG:HD3	1:K:215:MET:HE3	0.46	1.86	1	1
1:J:230:VAL:HG12	1:K:228:ALA:CB	0.46	2.41	1	2
1:K:234:ALA:CB	1:L:232:ALA:HB2	0.46	2.40	1	2
1:L:150:ILE:HD11	1:L:172:LEU:CD2	0.46	2.29	2	1
1:G:149:SER:O	1:G:150:ILE:HD13	0.46	2.11	9	1
1:K:177:ALA:HB3	1:K:182:LYS:HG3	0.46	1.87	4	1
1:K:150:ILE:HG23	1:K:189:LEU:CD1	0.46	2.40	8	2
1:J:151:LEU:H	1:J:151:LEU:HD12	0.46	1.71	6	1
1:I:211:LEU:O	1:I:211:LEU:HD13	0.45	2.12	4	1
1:H:227:LYS:HB3	3:H:302:A1CCY:C27	0.45	2.41	7	2
1:I:164:TYR:CE2	1:I:190:LEU:HD12	0.45	2.46	9	1
1:I:175:GLU:OE1	1:I:177:ALA:HB2	0.45	2.11	3	1
1:L:150:ILE:CG2	1:L:189:LEU:HD22	0.45	2.39	1	1
1:I:189:LEU:HD21	1:I:193:ASN:HD21	0.45	1.70	4	1
1:I:175:GLU:OE2	1:I:177:ALA:HB3	0.45	2.11	5	1
1:J:177:ALA:HB3	1:J:182:LYS:HE2	0.45	1.88	7	1
1:K:150:ILE:CG2	1:K:189:LEU:HD22	0.45	2.41	2	1
1:G:191:VAL:HG22	1:G:202:LEU:HD22	0.45	1.88	6	1
1:H:177:ALA:HB1	1:H:181:VAL:CG1	0.45	2.41	9	1
1:H:175:GLU:OE1	1:H:185:MET:HE1	0.45	2.11	4	1
1:G:154:ARG:HH11	1:H:215:MET:HE2	0.45	1.72	6	1
1:K:150:ILE:HG23	1:K:189:LEU:CB	0.45	2.42	6	1
1:I:212:GLU:OE2	1:I:215:MET:HE3	0.45	2.12	4	1
1:L:162:ARG:NH2	1:L:165:VAL:HG11	0.45	2.28	4	1
1:L:162:ARG:NH2	1:L:211:LEU:HD12	0.44	2.27	4	1
1:I:177:ALA:HB1	1:I:181:VAL:CB	0.44	2.42	5	1
1:I:172:LEU:HD13	1:I:185:MET:SD	0.44	2.52	1	1
1:L:150:ILE:CG1	1:L:189:LEU:HD22	0.44	2.42	10	1
1:H:168:PHE:O	1:H:172:LEU:HD23	0.44	2.13	3	1
1:I:150:ILE:HG23	1:I:189:LEU:HD13	0.44	1.89	7	3
1:I:172:LEU:HD22	1:I:185:MET:SD	0.44	2.53	4	1
1:J:218:CYS:O	1:J:221:VAL:HG23	0.44	2.12	6	2
1:L:211:LEU:C	1:L:211:LEU:HD13	0.44	2.38	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:I:149:SER:C	1:I:150:ILE:HD12	0.44	2.38	10	1
1:J:168:PHE:CD2	1:J:190:LEU:HD13	0.44	2.47	4	1
1:I:226:HIS:O	1:I:230:VAL:HG23	0.44	2.11	1	1
1:H:198:CYS:HA	1:H:221:VAL:HG21	0.44	1.89	8	1
1:I:189:LEU:HD23	1:I:193:ASN:HD21	0.44	1.73	7	1
1:I:149:SER:O	1:I:171:THR:HG23	0.44	2.13	8	1
1:L:150:ILE:HG23	1:L:189:LEU:CG	0.43	2.43	1	1
1:K:191:VAL:HG22	1:K:202:LEU:HD22	0.43	1.91	6	1
1:H:191:VAL:HG22	1:H:202:LEU:HG	0.43	1.88	8	2
1:I:205:LEU:HD21	1:I:217:ALA:CB	0.43	2.42	7	1
1:L:177:ALA:HB1	1:L:181:VAL:CG1	0.43	2.43	8	4
1:J:150:ILE:HG23	1:J:189:LEU:HB3	0.43	1.90	6	1
1:J:198:CYS:O	1:J:202:LEU:HD13	0.43	2.14	6	1
1:J:150:ILE:HD12	1:J:150:ILE:N	0.43	2.29	7	1
1:G:226:HIS:O	1:G:230:VAL:HG23	0.43	2.13	5	2
1:I:150:ILE:HD11	1:I:171:THR:HG23	0.43	1.91	6	1
1:L:202:LEU:HD23	1:L:214:MET:SD	0.43	2.53	6	1
1:G:215:MET:HE3	1:L:154:ARG:HD3	0.43	1.89	1	1
1:G:168:PHE:O	1:G:172:LEU:HD23	0.43	2.13	5	1
1:K:191:VAL:HG22	1:K:202:LEU:CD2	0.43	2.43	6	1
1:L:168:PHE:CZ	1:L:186:THR:HG22	0.43	2.49	7	1
1:K:150:ILE:HG13	1:K:189:LEU:HD22	0.43	1.89	2	3
1:G:238:VAL:HG21	1:H:233:GLU:OE1	0.43	2.13	3	1
1:H:150:ILE:HD11	1:H:172:LEU:HD21	0.43	1.91	3	1
1:G:153:ILE:HD11	1:G:167:ARG:HB3	0.43	1.89	10	1
1:J:149:SER:C	1:J:150:ILE:HD12	0.43	2.37	1	1
1:I:177:ALA:HB1	1:I:181:VAL:HB	0.43	1.91	3	1
1:H:177:ALA:HB3	1:H:182:LYS:HE3	0.43	1.91	7	2
1:L:150:ILE:HG22	1:L:185:MET:SD	0.43	2.53	9	1
1:J:184:TRP:CZ2	1:J:188:THR:HG21	0.43	2.48	1	1
1:H:182:LYS:O	1:H:186:THR:HG23	0.43	2.14	6	2
1:L:212:GLU:HG2	1:L:215:MET:HE2	0.43	1.91	1	1
1:K:221:VAL:HG12	1:K:222:GLY:N	0.43	2.29	2	1
1:G:149:SER:C	1:G:150:ILE:HD12	0.43	2.38	3	1
1:J:191:VAL:HA	1:J:202:LEU:HD23	0.43	1.91	6	1
1:I:231:LEU:C	1:I:231:LEU:HD23	0.43	2.39	7	1
1:G:198:CYS:O	1:G:202:LEU:HD12	0.42	2.14	6	1
1:J:238:VAL:HG11	1:K:236:SER:HB3	0.42	1.90	5	1
1:K:150:ILE:HD13	1:K:185:MET:HE2	0.42	1.89	9	1
1:H:153:ILE:HG21	1:H:168:PHE:CD1	0.42	2.50	10	1
1:J:162:ARG:HH22	1:J:211:LEU:HD12	0.42	1.74	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:G:190:LEU:O	1:G:194:ALA:HB2	0.42	2.14	8	1
1:H:150:ILE:HG22	1:H:185:MET:SD	0.42	2.55	6	1
1:H:231:LEU:HD23	1:H:232:ALA:CA	0.42	2.45	10	1
1:H:201:ILE:HD13	1:H:217:ALA:O	0.42	2.15	1	1
1:G:150:ILE:HG23	1:G:189:LEU:HD22	0.42	1.92	2	1
1:J:231:LEU:HD11	1:K:231:LEU:HD22	0.42	1.92	5	1
1:K:202:LEU:HD11	1:K:218:CYS:SG	0.42	2.55	5	1
1:J:151:LEU:HD12	1:J:151:LEU:N	0.42	2.30	6	1
1:H:150:ILE:HD13	1:H:171:THR:HG23	0.42	1.91	9	2
1:H:191:VAL:HG22	1:H:202:LEU:CD2	0.42	2.45	1	3
1:L:153:ILE:HD13	1:L:171:THR:HG21	0.42	1.92	4	1
1:H:150:ILE:CD1	1:H:185:MET:HE3	0.42	2.44	10	1
1:H:178:SER:HB2	1:H:181:VAL:HG23	0.42	1.90	2	1
1:I:189:LEU:HD21	1:I:193:ASN:OD1	0.42	2.13	3	1
1:H:164:TYR:CE2	1:H:194:ALA:HB2	0.42	2.50	9	1
1:I:167:ARG:O	1:I:171:THR:HG22	0.42	2.15	9	1
1:L:150:ILE:HD13	1:L:185:MET:SD	0.42	2.55	1	1
1:K:148:THR:N	1:K:151:LEU:HD11	0.42	2.30	2	1
1:K:198:CYS:HA	1:K:201:ILE:HD12	0.42	1.92	6	2
1:H:150:ILE:CD1	1:H:171:THR:HG23	0.42	2.45	6	1
1:J:201:ILE:HG21	1:J:218:CYS:SG	0.42	2.55	6	1
1:J:150:ILE:HD13	1:J:185:MET:SD	0.42	2.55	7	1
1:I:168:PHE:CD1	1:I:190:LEU:HD12	0.42	2.50	8	1
1:L:150:ILE:HG22	1:L:150:ILE:O	0.41	2.15	2	1
1:H:150:ILE:HD13	1:H:185:MET:HE2	0.41	1.91	3	1
1:H:171:THR:HA	1:H:174:ALA:HB3	0.41	1.91	9	2
1:G:150:ILE:CD1	1:G:172:LEU:HD21	0.41	2.46	1	1
3:H:302:A1CCY:C2	1:I:231:LEU:HD13	0.41	2.45	2	1
1:K:226:HIS:CE1	1:K:230:VAL:HG21	0.41	2.51	2	1
1:L:190:LEU:HD23	1:L:211:LEU:HD21	0.41	1.91	6	1
1:G:215:MET:HE2	1:L:154:ARG:HD3	0.41	1.92	8	1
1:K:172:LEU:HD11	1:K:185:MET:HB2	0.41	1.92	3	1
1:J:211:LEU:HD22	1:J:214:MET:HE3	0.41	1.92	7	1
1:I:184:TRP:CZ2	1:I:188:THR:HG21	0.41	2.51	7	1
1:I:178:SER:HB2	1:I:181:VAL:HG23	0.41	1.93	7	1
1:H:229:ARG:O	1:H:232:ALA:HB3	0.41	2.16	10	1
1:H:223:GLY:HA2	1:H:227:LYS:HB2	0.41	1.93	2	1
1:H:226:HIS:O	1:H:230:VAL:HG23	0.41	2.16	5	1
1:I:153:ILE:HD11	1:I:167:ARG:CB	0.41	2.46	7	1
1:L:172:LEU:HD13	1:L:175:GLU:OE2	0.41	2.16	8	1
1:L:150:ILE:HG22	1:L:185:MET:CE	0.41	2.46	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:I:153:ILE:HG21	1:I:168:PHE:CE1	0.41	2.50	10	1
1:J:178:SER:HB2	1:J:181:VAL:HG23	0.41	1.92	10	1
1:H:147:PRO:C	1:H:148:THR:HG23	0.41	2.41	1	1
1:H:150:ILE:O	1:H:189:LEU:HD13	0.41	2.15	6	1
1:K:151:LEU:HD12	1:K:151:LEU:N	0.41	2.29	6	1
1:I:150:ILE:HD11	1:I:168:PHE:CE2	0.40	2.51	1	1
1:J:150:ILE:HG21	1:J:185:MET:HG2	0.40	1.92	1	1
1:J:189:LEU:HD21	1:J:193:ASN:ND2	0.40	2.32	3	1
1:G:157:PRO:CB	1:H:222:GLY:HA3	0.40	2.47	8	1
1:H:231:LEU:HD23	1:H:232:ALA:N	0.40	2.31	10	1
1:I:198:CYS:O	1:I:202:LEU:HD22	0.40	2.16	10	1
1:G:151:LEU:HD12	1:G:151:LEU:N	0.40	2.30	6	1
1:I:231:LEU:HD21	1:I:235:MET:CG	0.40	2.46	10	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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	G	93/102 (91%)	86±2 (92±2%)	5±2 (6±2%)	2±1 (2±1%)	7	43
1	H	94/102 (92%)	79±2 (84±2%)	12±2 (13±3%)	3±1 (3±1%)	6	40
1	I	85/102 (83%)	74±2 (87±3%)	9±2 (11±3%)	2±1 (2±1%)	8	47
1	J	93/102 (91%)	82±2 (88±2%)	9±2 (9±3%)	2±1 (2±1%)	7	44
1	K	90/102 (88%)	79±2 (88±2%)	10±2 (11±2%)	2±1 (2±1%)	9	51
1	L	91/102 (89%)	80±1 (88±1%)	10±1 (11±1%)	2±0 (2±1%)	9	52
All	All	5460/6120 (89%)	4790 (88%)	547 (10%)	123 (2%)	7	46

All 33 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	G	195	ASN	10
1	H	195	ASN	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	I	195	ASN	10
1	J	195	ASN	10
1	K	195	ASN	10
1	L	195	ASN	10
1	H	223	GLY	7
1	I	150	ILE	6
1	J	224	PRO	5
1	G	239	THR	4
1	J	150	ILE	4
1	L	150	ILE	4
1	G	157	PRO	3
1	G	150	ILE	3
1	H	230	VAL	3
1	H	224	PRO	2
1	K	150	ILE	2
1	K	196	PRO	2
1	G	224	PRO	2
1	H	150	ILE	2
1	K	148	THR	2
1	H	157	PRO	1
1	I	196	PRO	1
1	H	239	THR	1
1	J	153	ILE	1
1	K	153	ILE	1
1	L	148	THR	1
1	G	210	THR	1
1	L	178	SER	1
1	I	148	THR	1
1	I	153	ILE	1
1	J	148	THR	1
1	J	152	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	G	77/83 (93%)	70±1 (92±2%)	6±1 (8±2%)	11 60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	H	78/83 (94%)	68±3 (88±3%)	10±3 (12±3%)	6	48
1	I	71/83 (86%)	62±2 (87±3%)	9±2 (13±3%)	6	47
1	J	77/83 (93%)	70±2 (90±3%)	7±2 (10±3%)	9	56
1	K	74/83 (89%)	66±2 (90±2%)	8±2 (10±2%)	8	53
1	L	75/83 (90%)	68±3 (90±4%)	7±3 (10±4%)	9	55
All	All	4520/4980 (91%)	4043 (89%)	477 (11%)	8	53

All 132 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	G	189	LEU	10
1	G	211	LEU	10
1	H	150	ILE	10
1	I	211	LEU	10
1	J	202	LEU	10
1	J	211	LEU	10
1	K	189	LEU	10
1	K	211	LEU	10
1	G	172	LEU	9
1	H	172	LEU	9
1	H	189	LEU	9
1	H	211	LEU	9
1	J	189	LEU	9
1	K	172	LEU	9
1	L	189	LEU	9
1	I	189	LEU	9
1	L	211	LEU	9
1	I	212	GLU	8
1	I	150	ILE	8
1	G	150	ILE	7
1	L	172	LEU	7
1	H	151	LEU	7
1	I	151	LEU	7
1	J	150	ILE	7
1	L	230	VAL	7
1	L	150	ILE	7
1	H	219	GLN	6
1	H	227	LYS	6
1	G	168	PHE	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	H	168	PHE	6
1	I	193	ASN	6
1	K	150	ILE	6
1	K	168	PHE	6
1	L	212	GLU	6
1	K	230	VAL	5
1	H	231	LEU	5
1	I	168	PHE	5
1	I	202	LEU	5
1	I	227	LYS	5
1	J	212	GLU	5
1	H	212	GLU	5
1	G	193	ASN	4
1	I	172	LEU	4
1	H	166	ASP	4
1	H	238	VAL	4
1	J	183	ASN	4
1	L	168	PHE	4
1	J	203	LYS	3
1	G	238	VAL	3
1	H	239	THR	3
1	I	231	LEU	3
1	K	237	GLN	3
1	L	151	LEU	3
1	H	193	ASN	3
1	I	215	MET	3
1	J	151	LEU	3
1	J	227	LYS	3
1	K	212	GLU	3
1	L	180	GLU	3
1	K	183	ASN	3
1	J	237	GLN	3
1	K	151	LEU	3
1	K	215	MET	3
1	J	215	MET	3
1	J	219	GLN	3
1	L	215	MET	3
1	G	215	MET	2
1	G	219	GLN	2
1	G	231	LEU	2
1	I	170	LYS	2
1	I	219	GLN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	L	202	LEU	2
1	H	170	LYS	2
1	H	202	LEU	2
1	J	168	PHE	2
1	J	180	GLU	2
1	G	202	LEU	2
1	I	183	ASN	2
1	L	173	ARG	2
1	G	212	GLU	2
1	I	171	THR	2
1	I	190	LEU	2
1	G	151	LEU	2
1	K	202	LEU	2
1	H	183	ASN	2
1	L	158	LYS	2
1	K	205	LEU	2
1	G	170	LYS	1
1	G	180	GLU	1
1	K	180	GLU	1
1	G	203	LYS	1
1	I	203	LYS	1
1	K	154	ARG	1
1	K	171	THR	1
1	H	198	CYS	1
1	J	155	GLN	1
1	L	219	GLN	1
1	G	239	THR	1
1	I	195	ASN	1
1	K	185	MET	1
1	K	198	CYS	1
1	I	230	VAL	1
1	L	201	ILE	1
1	I	162	ARG	1
1	I	180	GLU	1
1	H	173	ARG	1
1	I	152	ASP	1
1	J	172	LEU	1
1	J	231	LEU	1
1	J	238	VAL	1
1	K	184	TRP	1
1	K	231	LEU	1
1	L	163	ASP	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	L	171	THR	1
1	L	227	LYS	1
1	H	157	PRO	1
1	H	163	ASP	1
1	I	181	VAL	1
1	J	193	ASN	1
1	J	195	ASN	1
1	K	158	LYS	1
1	K	173	ARG	1
1	K	227	LYS	1
1	L	162	ARG	1
1	L	182	LYS	1
1	L	183	ASN	1
1	H	215	MET	1
1	K	193	ASN	1
1	L	237	GLN	1
1	L	238	VAL	1
1	J	152	ASP	1
1	K	178	SER	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

2 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is

considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	IHP	H	301	-	36,36,36	1.67±0.00	5±0 (15±1%)
3	A1CCY	H	302	-	36,36,36	2.14±0.01	8±0 (22±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	IHP	H	301	-	60,60,60	1.30±0.00	7±0 (11±0%)
3	A1CCY	H	302	-	44,54,54	2.32±0.01	10±0 (22±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	IHP	H	301	-	-	0±0,30,54,54	0±0,1,1,1
3	A1CCY	H	302	-	-	0±0,24,32,32	0±0,4,4,4

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
3	H	302	A1CCY	C12-N23	6.57	1.54	1.47	3	10
3	H	302	A1CCY	C13-C11	5.95	1.60	1.52	10	10
2	H	301	IHP	C6-C5	5.41	1.63	1.52	5	10
3	H	302	A1CCY	C18-C13	5.06	1.47	1.39	3	10
2	H	301	IHP	P6-O16	3.40	1.53	1.59	8	10
3	H	302	A1CCY	C6-C1	3.09	1.45	1.39	8	10
2	H	301	IHP	C5-C4	2.99	1.58	1.52	8	10
2	H	301	IHP	C2-C1	2.83	1.58	1.52	4	10
3	H	302	A1CCY	C14-C13	2.83	1.43	1.39	9	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
3	H	302	A1CCY	C8-N10	2.57	1.52	1.48	6	10
3	H	302	A1CCY	C27-C26	2.53	1.34	1.41	7	10
2	H	301	IHP	P2-O42	2.23	1.46	1.54	1	10
3	H	302	A1CCY	C2-C1	2.21	1.36	1.39	1	10
2	H	301	IHP	P1-O11	2.02	1.63	1.59	5	4

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
3	H	302	A1CCY	C28-N23-C24	7.99	117.33	122.90	6	10
3	H	302	A1CCY	C9-C1-C6	7.32	105.58	110.50	2	10
3	H	302	A1CCY	C6-C7-C8	6.53	96.46	102.89	5	10
2	H	301	IHP	C5-C4-C3	3.82	102.04	110.43	7	10
2	H	301	IHP	O15-C5-C6	3.26	115.71	108.76	6	10
3	H	302	A1CCY	C7-C6-C1	3.15	112.62	110.50	5	10
3	H	302	A1CCY	C17-C16-C19	3.13	115.08	121.47	6	10
2	H	301	IHP	C5-C6-C1	3.07	103.68	110.43	7	10
3	H	302	A1CCY	C15-C16-C19	2.79	127.19	121.47	6	10
2	H	301	IHP	O34-P4-O14	2.68	116.29	105.85	10	10
2	H	301	IHP	C6-C5-C4	2.52	104.90	110.43	1	10
3	H	302	A1CCY	O29-C24-N23	2.49	117.22	120.53	1	10
2	H	301	IHP	O15-P5-O25	2.44	100.63	109.33	6	10
3	H	302	A1CCY	C3-C2-C1	2.27	117.56	120.88	7	10
3	H	302	A1CCY	C21-C19-C16	2.13	115.37	110.35	2	10
2	H	301	IHP	O46-P6-O36	2.07	115.55	107.80	6	10
3	H	302	A1CCY	C14-C13-C18	2.05	115.76	118.30	8	9

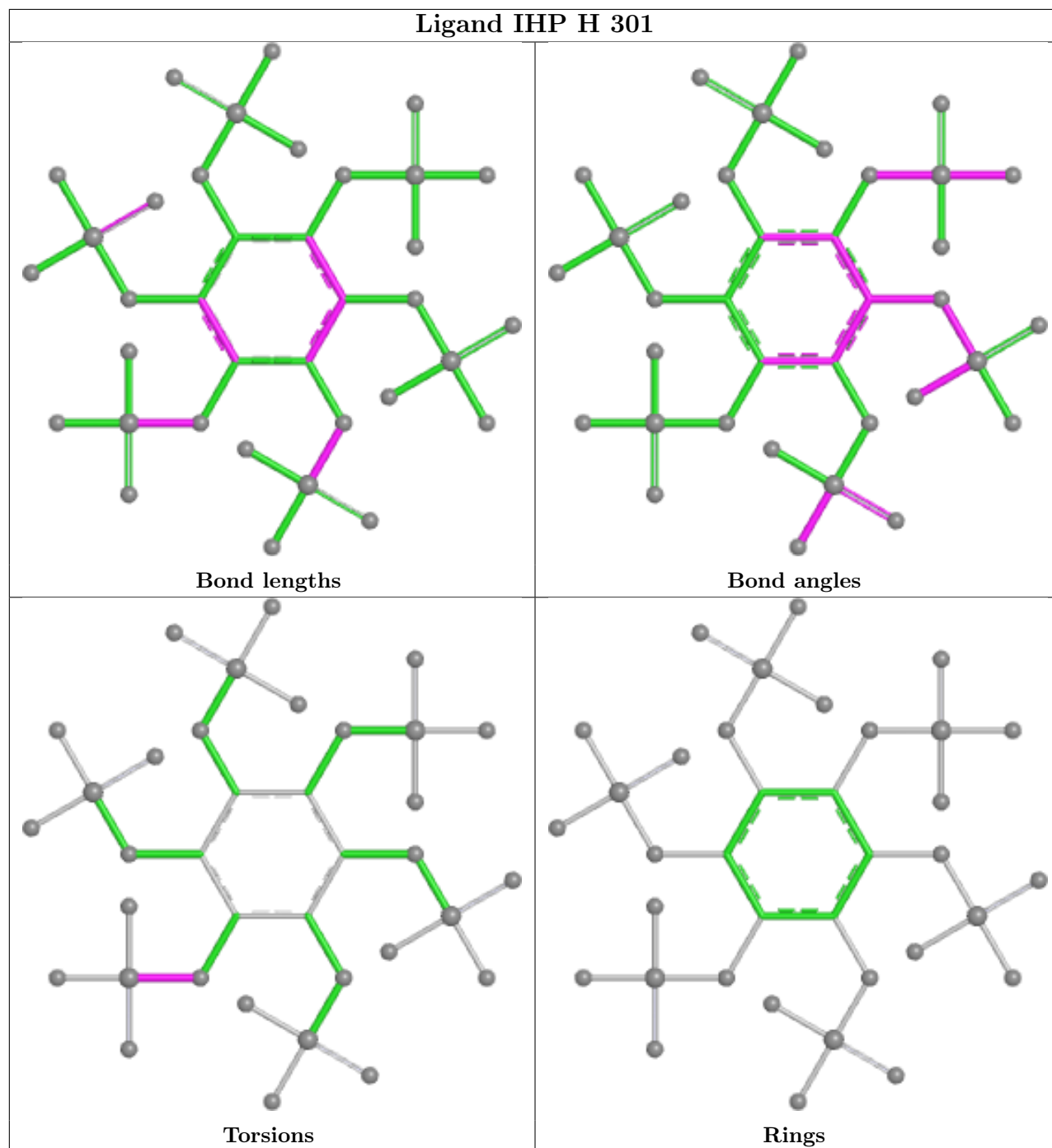
There are no chirality outliers.

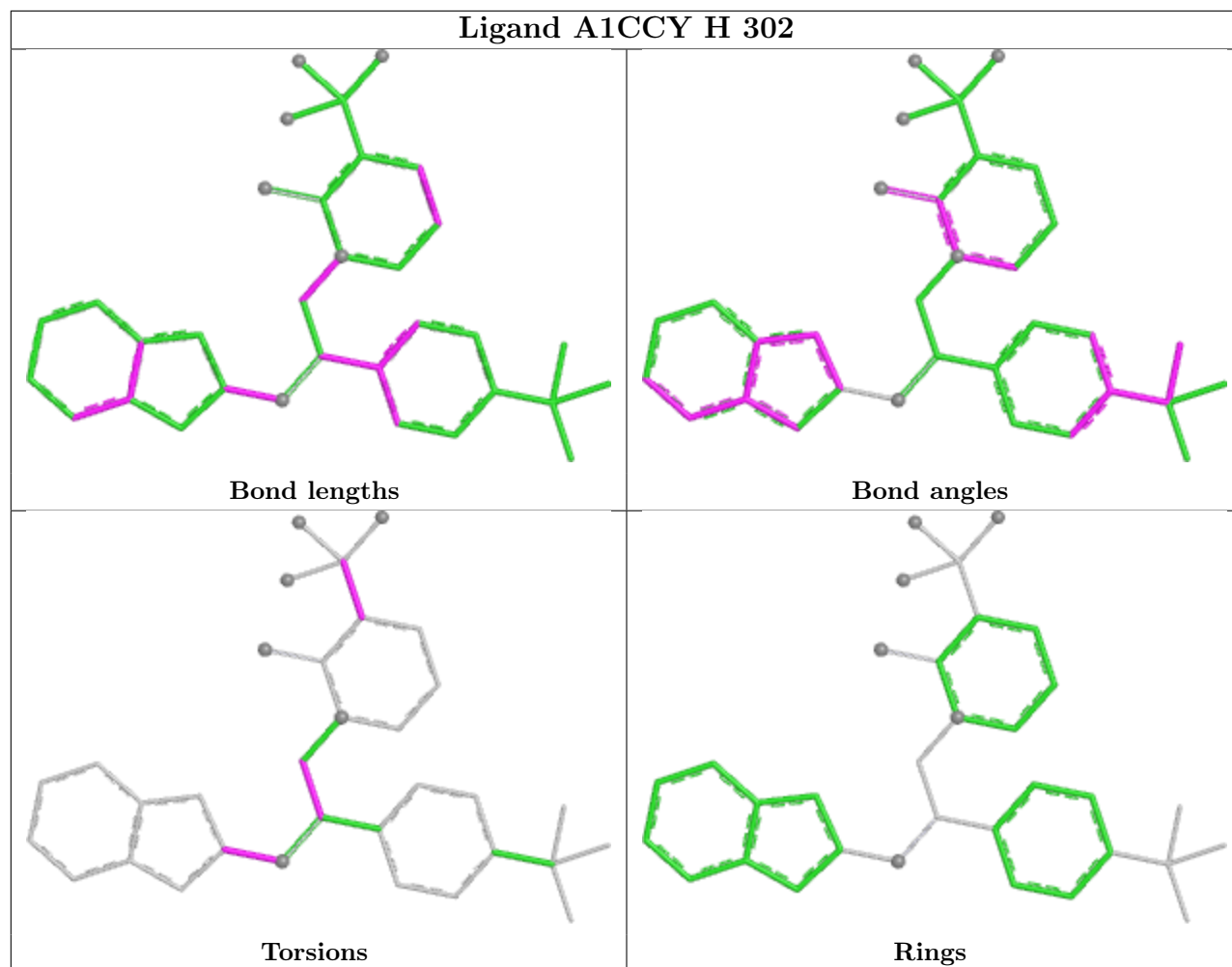
There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and

any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.





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 6% for the well-defined parts and 6% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *D_1000295903_cs_P1.str.V1*

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	516
Number of shifts mapped to atoms	516
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	96	-0.80 ± 0.20	Should be checked
$^{13}\text{C}_\beta$	87	0.10 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	92	-0.78 ± 0.21	Should be applied
^{15}N	93	-0.45 ± 0.80	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 6%, i.e. 474 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 7329. 0 out of 82 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	257/2706 (9%)	2/1100 (0%)	174/1092 (16%)	81/514 (16%)
Sidechain	198/4281 (5%)	8/2780 (0%)	190/1322 (14%)	0/179 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	19/342 (6%)	1/168 (1%)	18/162 (11%)	0/12 (0%)
Overall	474/7329 (6%)	11/4048 (0%)	382/2576 (15%)	81/705 (11%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 6%, i.e. 501 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 8046. 0 out of 84 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	278/3042 (9%)	2/1242 (0%)	188/1224 (15%)	88/576 (15%)
Sidechain	204/4662 (4%)	8/3036 (0%)	196/1440 (14%)	0/186 (0%)
Aromatic	19/342 (6%)	1/168 (1%)	18/162 (11%)	0/12 (0%)
Overall	501/8046 (6%)	11/4446 (0%)	402/2826 (14%)	88/774 (11%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

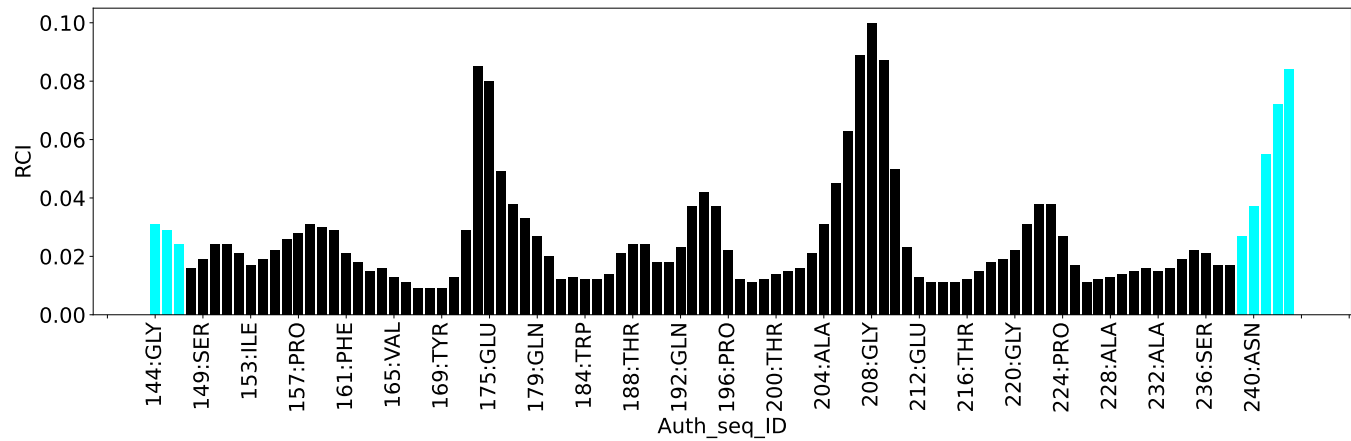
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain G:



8 NMR restraints analysis [i](#)

8.1 Conformationally restricting restraints [i](#)

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

Description	Value
Total distance restraints	2536
Intra-residue ($ i-j =0$)	834
Sequential ($ i-j =1$)	291
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	522
Long range ($ i-j \geq 5$)	474
Inter-chain	415
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	1116
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	5.9
Number of long range restraints per residue ¹	0.8

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

8.2 Residual restraint violations [i](#)

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

8.2.1 Average number of distance violations per model [i](#)

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	28.2	0.2
0.2-0.5 (Medium)	59.4	0.5
>0.5 (Large)	81.5	2.44

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	156.5	9.99
10.0-20.0 (Medium)	29.8	19.87
>20.0 (Large)	13.9	76.27

9 Distance violation analysis ⓘ

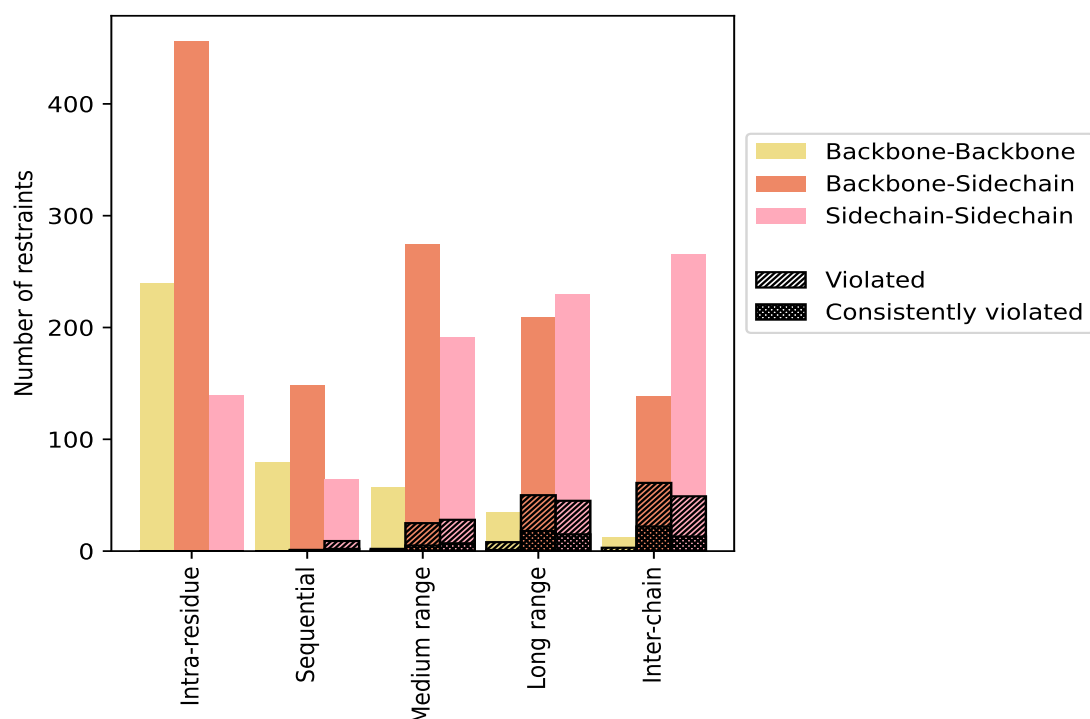
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	834	32.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	239	9.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	456	18.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	139	5.5	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	291	11.5	10	3.4	0.4	3	1.0	0.1
Backbone-Backbone	79	3.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	148	5.8	1	0.7	0.0	1	0.7	0.0
Sidechain-Sidechain	64	2.5	9	14.1	0.4	2	3.1	0.1
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	522	20.6	55	10.5	2.2	13	2.5	0.5
Backbone-Backbone	57	2.2	2	3.5	0.1	1	1.8	0.0
Backbone-Sidechain	274	10.8	25	9.1	1.0	5	1.8	0.2
Sidechain-Sidechain	191	7.5	28	14.7	1.1	7	3.7	0.3
Long range ($i-j \geq 5$)	474	18.7	103	21.7	4.1	34	7.2	1.3
Backbone-Backbone	35	1.4	8	22.9	0.3	1	2.9	0.0
Backbone-Sidechain	209	8.2	50	23.9	2.0	18	8.6	0.7
Sidechain-Sidechain	230	9.1	45	19.6	1.8	15	6.5	0.6
Inter-chain	415	16.4	113	27.2	4.5	35	8.4	1.4
Backbone-Backbone	12	0.5	3	25.0	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	138	5.4	61	44.2	2.4	22	15.9	0.9
Sidechain-Sidechain	265	10.4	49	18.5	1.9	13	4.9	0.5
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	2536	100.0	281	11.1	11.1	85	3.4	3.4
Backbone-Backbone	422	16.6	13	3.1	0.5	2	0.5	0.1
Backbone-Sidechain	1225	48.3	137	11.2	5.4	46	3.8	1.8
Sidechain-Sidechain	889	35.1	131	14.7	5.2	37	4.2	1.5

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

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



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

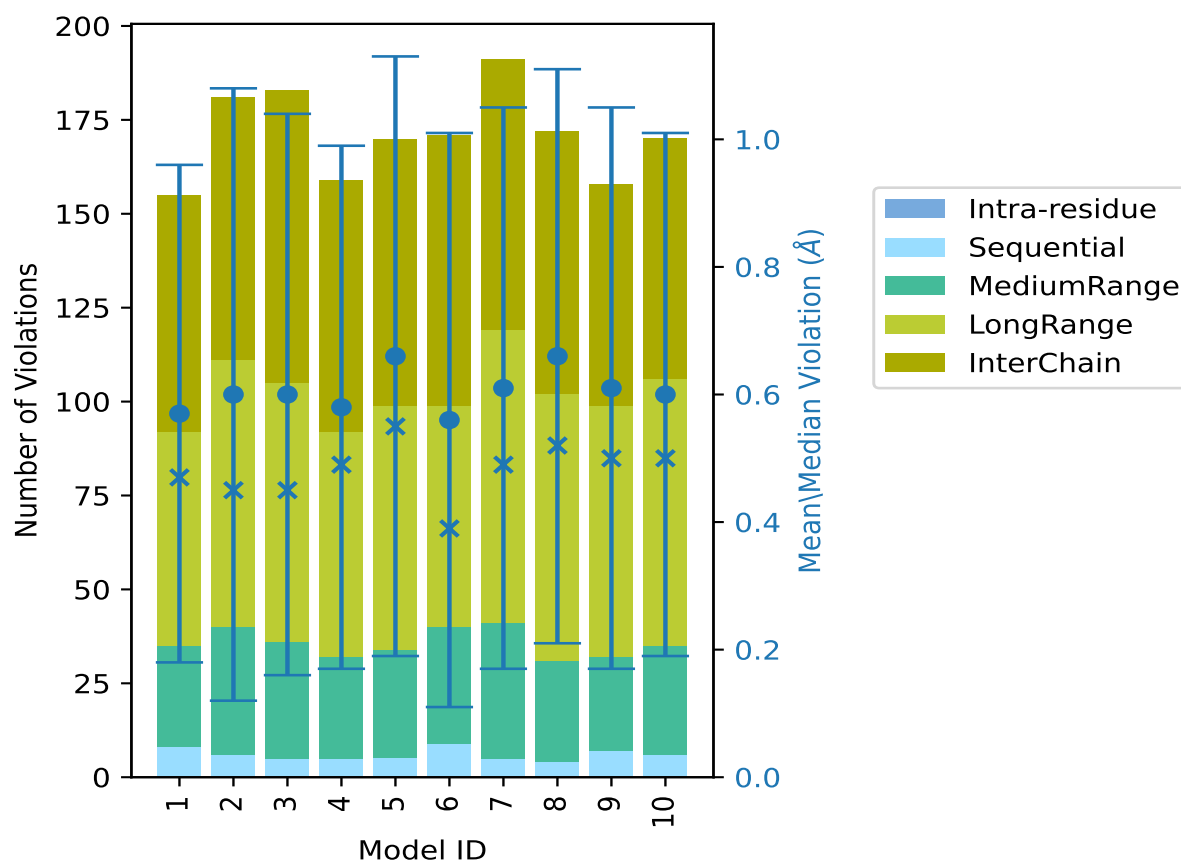
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	0	8	27	57	63	155	0.57	1.74	0.39	0.47
2	0	6	34	71	70	181	0.6	2.13	0.48	0.45
3	0	5	31	69	78	183	0.6	2.3	0.44	0.45
4	0	5	27	60	67	159	0.58	2.13	0.41	0.49
5	0	5	29	65	71	170	0.66	2.17	0.47	0.55
6	0	9	31	59	72	171	0.56	1.98	0.45	0.39
7	0	5	36	78	72	191	0.61	2.44	0.44	0.49
8	0	4	27	71	70	172	0.66	2.37	0.45	0.52
9	0	7	25	67	59	158	0.61	2.15	0.44	0.5
10	0	6	29	71	64	170	0.6	2.12	0.41	0.5

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

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



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble [i](#)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2255(IR:834, SQ:281, MR:467, LR:371, IC:302) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	1	8	8	17	34	1	10.0
0	1	8	7	11	27	2	20.0
0	1	8	15	9	33	3	30.0

Continued on next page...

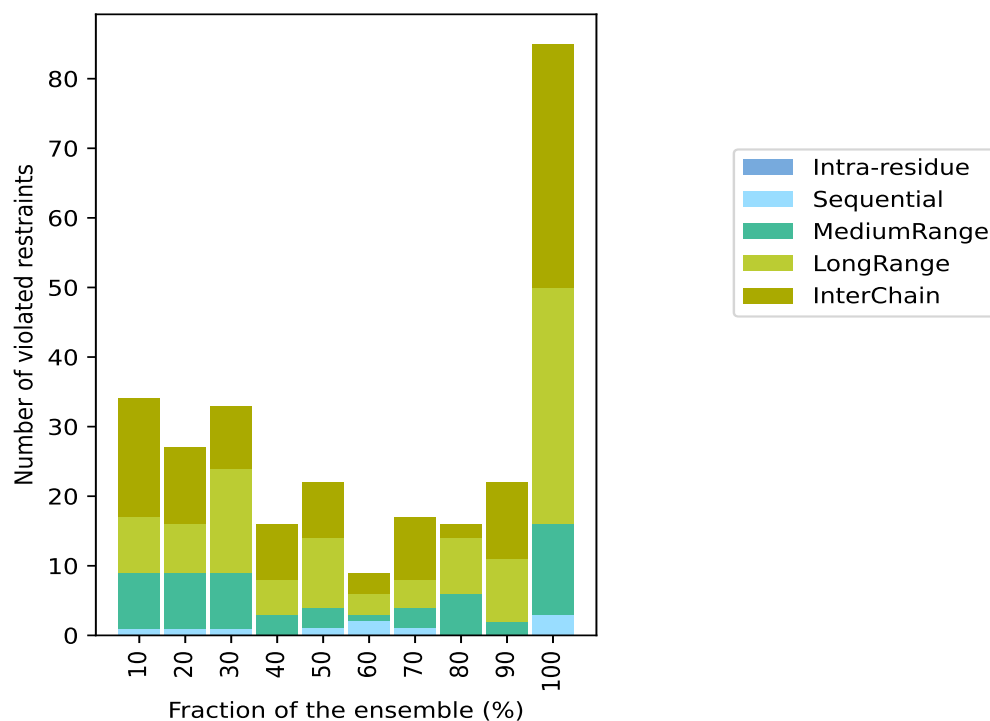
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	0	3	5	8	16	4	40.0
0	1	3	10	8	22	5	50.0
0	2	1	3	3	9	6	60.0
0	1	3	4	9	17	7	70.0
0	0	6	8	2	16	8	80.0
0	0	2	9	11	22	9	90.0
0	3	13	34	35	85	10	100.0

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

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

9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble ⓘ

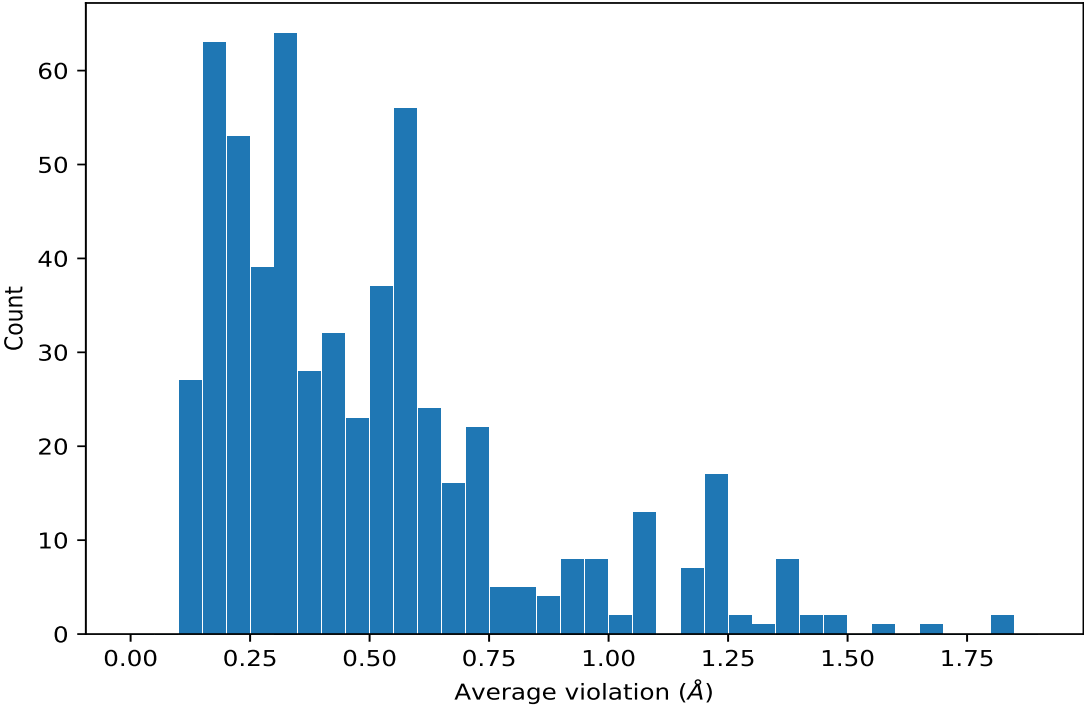


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble ⓘ

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations ⓘ

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

in the ensemble



9.4.2 Table: Most violated distance restraints ⓘ

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	10	1.84	0.35	1.86
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	10	1.82	0.28	1.92
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	10	1.69	0.19	1.72
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	10	1.57	0.45	1.71
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	10	1.48	0.48	1.56
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	10	1.46	0.14	1.47
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	10	1.41	0.2	1.48
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	10	1.38	0.19	1.34
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	10	1.37	0.19	1.4
(1,1469)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	10	1.35	0.49	1.53
(1,1469)	1:171:G:THR:CG2	1:152:G:ASP:CB	10	1.35	0.49	1.53
(1,1469)	1:171:L:THR:CG2	1:152:L:ASP:CB	10	1.35	0.49	1.53
(1,1469)	1:171:H:THR:CG2	1:152:H:ASP:CB	10	1.35	0.49	1.53
(1,1469)	1:171:K:THR:CG2	1:152:K:ASP:CB	10	1.35	0.49	1.53
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	10	1.35	0.2	1.35

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	10	1.29	0.21	1.33
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	10	1.26	0.16	1.25
(1,501)	1:154:L:ARG:CG	1:192:L:GLN:CA	10	1.23	0.22	1.25
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	10	1.23	0.22	1.25
(1,501)	1:154:G:ARG:CG	1:192:G:GLN:CA	10	1.23	0.22	1.25
(1,916)	1:163:I:ASP:CB	1:161:I:PHE:CG	10	1.23	0.12	1.23
(1,916)	1:163:L:ASP:CB	1:161:L:PHE:CG	10	1.23	0.12	1.23
(1,916)	1:163:K:ASP:CB	1:161:K:PHE:CG	10	1.23	0.12	1.23
(1,916)	1:163:J:ASP:CB	1:161:J:PHE:CG	10	1.23	0.12	1.23
(1,1784)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CB	10	1.21	0.27	1.21
(1,1784)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CB	10	1.21	0.27	1.21
(1,1784)	1:151:L:LEU:CG	1:189:L:LEU:CB	10	1.21	0.27	1.21
(1,1784)	1:151:I:LEU:CG	1:189:I:LEU:CB	10	1.21	0.27	1.21
(1,1784)	1:151:K:LEU:CG	1:189:K:LEU:CB	10	1.21	0.27	1.21
(1,1646)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CB	10	1.21	0.26	1.16
(1,1646)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:CB	10	1.21	0.26	1.16
(1,1646)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:CB	10	1.21	0.26	1.16
(1,1646)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:CB	10	1.21	0.26	1.16
(1,1892)	1:152:K:ASP:CB	1:149:K:SER:CB	10	1.17	0.46	1.21
(1,1892)	1:152:G:ASP:CB	1:149:G:SER:CB	10	1.17	0.46	1.21
(1,1892)	1:152:I:ASP:CB	1:149:I:SER:CB	10	1.17	0.46	1.21
(1,1892)	1:152:L:ASP:CB	1:149:L:SER:CB	10	1.17	0.46	1.21
(1,1892)	1:152:H:ASP:CB	1:149:H:SER:CB	10	1.17	0.46	1.21
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	10	1.15	0.44	1.12
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	10	1.08	0.39	1.1
(1,1907)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:CG2	10	1.08	0.39	1.1
(1,1907)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:CG2	10	1.08	0.39	1.1
(1,1304)	1:157:K:PRO:CG	1:197:K:ASP:CB	10	1.07	0.45	1.23
(1,1304)	1:157:L:PRO:CG	1:197:L:ASP:CB	10	1.07	0.45	1.23
(1,1304)	1:157:H:PRO:CG	1:197:H:ASP:CB	10	1.07	0.45	1.23
(1,1304)	1:157:I:PRO:CG	1:197:I:ASP:CB	10	1.07	0.45	1.23
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	10	1.03	0.53	0.98
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	10	1.01	0.17	1.08
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	10	0.99	0.16	1.02
(1,551)	1:150:L:ILE:CA	1:164:L:TYR:CZ	10	0.97	0.3	0.92
(1,551)	1:150:J:ILE:CA	1:164:J:TYR:CZ	10	0.97	0.3	0.92
(1,551)	1:150:H:ILE:CA	1:164:H:TYR:CZ	10	0.97	0.3	0.92
(1,551)	1:150:K:ILE:CA	1:164:K:TYR:CZ	10	0.97	0.3	0.92
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	10	0.92	0.14	0.92
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	10	0.91	0.3	0.99
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	10	0.91	0.3	0.99
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	10	0.91	0.21	0.98

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1845)	1:194:I:ALA:CA	1:197:I:ASP:CA	10	0.91	0.09	0.94
(1,1845)	1:194:K:ALA:CA	1:197:K:ASP:CA	10	0.91	0.09	0.94
(1,1845)	1:194:G:ALA:CA	1:197:G:ASP:CA	10	0.91	0.09	0.94
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	10	0.89	0.21	0.9
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	10	0.87	0.23	0.84
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	10	0.87	0.13	0.9
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	10	0.85	0.41	0.78
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	10	0.84	0.54	0.6
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	10	0.83	0.29	0.87
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	10	0.8	0.27	0.82
(1,1474)	1:167:J:ARG:CB	1:169:J:TYR:CD1	10	0.76	0.16	0.8
(1,1474)	1:167:H:ARG:CB	1:169:H:TYR:CD1	10	0.76	0.16	0.8
(1,1474)	1:167:I:ARG:CB	1:169:I:TYR:CD1	10	0.76	0.16	0.8
(1,1474)	1:167:K:ARG:CB	1:169:K:TYR:CD1	10	0.76	0.16	0.8
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	10	0.74	0.37	0.84
(1,1206)	1:172:H:LEU:CD1	1:189:H:LEU:CG	10	0.74	0.37	0.84
(1,1206)	1:172:I:LEU:CD1	1:189:I:LEU:CG	10	0.74	0.37	0.84
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	10	0.74	0.27	0.72
(1,1679)	1:191:I:VAL:CG1	1:198:I:CYS:CA	10	0.73	0.09	0.76
(1,1679)	1:191:J:VAL:CG1	1:198:J:CYS:CA	10	0.73	0.09	0.76
(1,1679)	1:191:L:VAL:CG1	1:198:L:CYS:CA	10	0.73	0.09	0.76
(1,1679)	1:191:G:VAL:CG1	1:198:G:CYS:CA	10	0.73	0.09	0.76
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	10	0.73	0.26	0.71
(1,744)	1:201:G:ILE:CG2	1:197:G:ASP:CB	10	0.71	0.19	0.66
(1,744)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	10	0.71	0.19	0.66
(1,744)	1:201:L:ILE:CG2	1:197:L:ASP:CB	10	0.71	0.19	0.66
(1,744)	1:201:K:ILE:CG2	1:197:K:ASP:CB	10	0.71	0.19	0.66
(1,744)	1:201:H:ILE:CG2	1:197:H:ASP:CB	10	0.71	0.19	0.66
(1,1191)	1:221:J:VAL:CG1	1:230:J:VAL:CG2	10	0.7	0.28	0.75
(1,1191)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG2	10	0.7	0.28	0.75
(1,1191)	1:221:L:VAL:CG2	1:230:L:VAL:CG2	10	0.7	0.28	0.75
(1,1191)	1:221:K:VAL:CG1	1:230:K:VAL:CG2	10	0.7	0.28	0.75
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	10	0.68	0.25	0.63
(1,1306)	1:153:L:ILE:CG2	1:169:L:TYR:C	10	0.68	0.25	0.63
(1,1529)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	10	0.66	0.12	0.64
(1,1529)	1:192:G:GLN:CA	1:164:G:TYR:CZ	10	0.66	0.12	0.64
(1,1529)	1:192:K:GLN:CA	1:164:K:TYR:CZ	10	0.66	0.12	0.64
(1,1357)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	10	0.64	0.23	0.76
(1,1357)	1:235:L:MET:CB	1:230:L:VAL:CA	10	0.64	0.23	0.76
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	10	0.63	0.12	0.6
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	10	0.62	0.15	0.66
(1,1008)	1:235:I:MET:CB	1:233:I:GLU:CG	10	0.61	0.18	0.58

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1008)	1:235:J:MET:CB	1:233:J:GLU:CG	10	0.61	0.18	0.58
(1,1008)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	10	0.61	0.18	0.58
(1,1008)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	10	0.61	0.18	0.58
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	10	0.61	0.17	0.62
(1,600)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	10	0.6	0.11	0.6
(1,600)	1:155:L:GLN:CB	1:196:L:PRO:CA	10	0.6	0.11	0.6
(1,600)	1:155:J:GLN:CB	1:196:J:PRO:CA	10	0.6	0.11	0.6
(1,600)	1:155:H:GLN:CB	1:196:H:PRO:CA	10	0.6	0.11	0.6
(1,1107)	1:150:J:ILE:CG2	1:168:J:PHE:C	10	0.59	0.33	0.5
(1,1107)	1:150:I:ILE:CG2	1:168:I:PHE:C	10	0.59	0.33	0.5
(1,1107)	1:150:H:ILE:CG2	1:168:H:PHE:C	10	0.59	0.33	0.5
(1,1107)	1:150:K:ILE:CG2	1:168:K:PHE:C	10	0.59	0.33	0.5
(1,1107)	1:150:L:ILE:CG2	1:168:L:PHE:C	10	0.59	0.33	0.5
(1,487)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	10	0.58	0.27	0.57
(1,487)	1:165:G:VAL:CG2	1:202:G:LEU:CG	10	0.58	0.27	0.57
(1,487)	1:165:L:VAL:CG2	1:202:L:LEU:CG	10	0.58	0.27	0.57
(1,487)	1:165:I:VAL:CG2	1:202:I:LEU:CG	10	0.58	0.27	0.57
(1,487)	1:165:J:VAL:CG2	1:202:J:LEU:CG	10	0.58	0.27	0.57
(1,2068)	1:214:J:MET:CB	1:198:J:CYS:CA	10	0.58	0.08	0.59
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	10	0.58	0.08	0.59
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	10	0.57	0.14	0.55
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	10	0.57	0.14	0.55
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	10	0.57	0.19	0.56
(1,2054)	1:155:K:GLN:CB	1:197:K:ASP:CB	10	0.57	0.19	0.56
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	10	0.56	0.14	0.52
(1,1733)	1:201:K:ILE:CG1	1:214:K:MET:CA	10	0.56	0.14	0.52
(1,1733)	1:201:H:ILE:CG1	1:214:H:MET:CA	10	0.56	0.14	0.52
(1,1733)	1:201:L:ILE:CG1	1:214:L:MET:CA	10	0.56	0.14	0.52
(1,823)	1:177:L:ALA:CB	1:185:L:MET:CA	10	0.56	0.21	0.56
(1,823)	1:177:K:ALA:CB	1:185:K:MET:CA	10	0.56	0.21	0.56
(1,823)	1:177:I:ALA:CB	1:185:I:MET:CA	10	0.56	0.21	0.56
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	10	0.56	0.15	0.54
(1,548)	1:198:I:CYS:CB	1:199:I:LYS:CE	10	0.56	0.15	0.54
(1,1551)	1:174:L:ALA:CB	1:182:L:LYS:CE	10	0.55	0.31	0.5
(1,1551)	1:174:K:ALA:CB	1:182:K:LYS:CE	10	0.55	0.31	0.5
(1,539)	1:179:J:GLN:CB	1:177:J:ALA:CA	10	0.54	0.09	0.55
(1,539)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	10	0.54	0.09	0.55
(1,539)	1:179:I:GLN:CB	1:177:I:ALA:CA	10	0.54	0.09	0.55
(1,539)	1:179:L:GLN:CB	1:177:L:ALA:CA	10	0.54	0.09	0.55
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	10	0.54	0.09	0.56
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	10	0.54	0.29	0.44
(1,875)	1:162:J:ARG:CA	1:218:J:CYS:CA	10	0.54	0.29	0.44

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,875)	1:162:L:ARG:CA	1:218:L:CYS:CA	10	0.54	0.29	0.44
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	10	0.53	0.15	0.54
(1,1997)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	10	0.53	0.16	0.55
(1,1997)	1:153:J:ILE:CG1	1:172:J:LEU:CA	10	0.53	0.16	0.55
(1,1997)	1:153:K:ILE:CG1	1:172:K:LEU:CA	10	0.53	0.16	0.55
(1,1997)	1:153:L:ILE:CG1	1:172:L:LEU:CA	10	0.53	0.16	0.55
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	10	0.53	0.21	0.52
(1,1052)	1:205:K:LEU:CB	1:208:K:GLY:CA	10	0.53	0.21	0.52
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	10	0.51	0.14	0.5
(1,1936)	1:160:L:PRO:CD	1:155:L:GLN:CA	10	0.51	0.14	0.5
(1,1936)	1:160:J:PRO:CD	1:155:J:GLN:CA	10	0.51	0.14	0.5
(1,2006)	1:175:H:GLU:CB	1:185:H:MET:CB	10	0.51	0.23	0.5
(1,2006)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	10	0.51	0.23	0.5
(1,2006)	1:175:L:GLU:CB	1:185:L:MET:CB	10	0.51	0.23	0.5
(1,2006)	1:175:J:GLU:CB	1:185:J:MET:CB	10	0.51	0.23	0.5
(1,2006)	1:175:G:GLU:CB	1:185:G:MET:CB	10	0.51	0.23	0.5
(1,1840)	1:211:J:LEU:CD2	1:209:J:ALA:CA	10	0.5	0.12	0.52
(1,1840)	1:211:K:LEU:CD2	1:209:K:ALA:CA	10	0.5	0.12	0.52
(1,1840)	1:211:L:LEU:CD2	1:209:L:ALA:CA	10	0.5	0.12	0.52
(1,1840)	1:211:I:LEU:CD2	1:209:I:ALA:CA	10	0.5	0.12	0.52
(1,1978)	1:214:L:MET:CG	1:190:L:LEU:CB	10	0.5	0.13	0.5
(1,1978)	1:214:H:MET:CG	1:190:H:LEU:CB	10	0.5	0.13	0.5
(1,1978)	1:214:I:MET:CG	1:190:I:LEU:CB	10	0.5	0.13	0.5
(1,1978)	1:214:G:MET:CG	1:190:G:LEU:CB	10	0.5	0.13	0.5
(1,1336)	1:221:H:VAL:CG2	1:219:H:GLN:CG	10	0.49	0.17	0.52
(1,1336)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	10	0.49	0.17	0.52
(1,1336)	1:221:G:VAL:CG2	1:219:G:GLN:CG	10	0.49	0.17	0.52
(1,1336)	1:221:J:VAL:CG2	1:219:J:GLN:CG	10	0.49	0.17	0.52
(1,1336)	1:221:L:VAL:CG2	1:219:L:GLN:CG	10	0.49	0.17	0.52
(1,1336)	1:221:K:VAL:CG2	1:219:K:GLN:CG	10	0.49	0.17	0.52
(1,1039)	1:201:L:ILE:CD1	1:202:L:LEU:C	10	0.48	0.04	0.48
(1,1039)	1:201:I:ILE:CD1	1:202:I:LEU:C	10	0.48	0.04	0.48
(1,1039)	1:201:K:ILE:CD1	1:202:K:LEU:C	10	0.48	0.04	0.48
(1,1039)	1:201:J:ILE:CD1	1:202:J:LEU:C	10	0.48	0.04	0.48
(1,1039)	1:201:G:ILE:CD1	1:202:G:LEU:C	10	0.48	0.04	0.48
(1,1039)	1:201:H:ILE:CD1	1:202:H:LEU:C	10	0.48	0.04	0.48
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	10	0.45	0.18	0.47
(1,142)	1:191:H:VAL:N	1:199:H:LYS:CE	10	0.44	0.07	0.45
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	10	0.44	0.07	0.45
(1,142)	1:191:L:VAL:N	1:199:L:LYS:CE	10	0.44	0.07	0.45
(1,1473)	1:190:G:LEU:CD1	1:169:G:TYR:CB	10	0.42	0.08	0.4
(1,1473)	1:190:L:LEU:CD1	1:169:L:TYR:CB	10	0.42	0.08	0.4

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1473)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	10	0.42	0.08	0.4
(1,1473)	1:190:J:LEU:CD1	1:169:J:TYR:CB	10	0.42	0.08	0.4
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	10	0.41	0.18	0.4
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	10	0.41	0.18	0.4
(1,879)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	10	0.41	0.16	0.47
(1,879)	1:230:H:VAL:CG2	1:221:H:VAL:CA	10	0.41	0.16	0.47
(1,879)	1:230:L:VAL:CG2	1:221:L:VAL:CA	10	0.41	0.16	0.47
(1,1648)	1:190:I:LEU:CD1	1:155:I:GLN:CG	10	0.4	0.19	0.37
(1,1648)	1:190:J:LEU:CD1	1:155:J:GLN:CG	10	0.4	0.19	0.37
(1,1648)	1:190:K:LEU:CD1	1:155:K:GLN:CG	10	0.4	0.19	0.37
(1,1873)	1:214:J:MET:CB	1:205:J:LEU:CA	10	0.38	0.06	0.36
(1,1873)	1:214:L:MET:CB	1:205:L:LEU:CA	10	0.38	0.06	0.36
(1,1873)	1:214:H:MET:CB	1:205:H:LEU:CA	10	0.38	0.06	0.36
(1,1873)	1:214:G:MET:CB	1:205:G:LEU:CA	10	0.38	0.06	0.36
(1,899)	1:201:J:ILE:CG1	1:205:J:LEU:CA	10	0.37	0.06	0.37
(1,899)	1:201:G:ILE:CG1	1:205:G:LEU:CA	10	0.37	0.06	0.37
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	10	0.37	0.06	0.37
(1,694)	1:196:H:PRO:CD	1:200:H:THR:CB	10	0.36	0.07	0.38
(1,694)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	10	0.36	0.07	0.38
(1,694)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	10	0.36	0.07	0.38
(1,2035)	1:198:J:CYS:CB	1:214:J:MET:CA	10	0.34	0.07	0.33
(1,2035)	1:198:K:CYS:CB	1:214:K:MET:CA	10	0.34	0.07	0.33
(1,2035)	1:198:I:CYS:CB	1:214:I:MET:CA	10	0.34	0.07	0.33
(1,2035)	1:198:L:CYS:CB	1:214:L:MET:CA	10	0.34	0.07	0.33
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	10	0.32	0.21	0.22
(1,2064)	1:160:I:PRO:CG	1:161:I:PHE:CG	10	0.3	0.06	0.3
(1,2064)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	10	0.3	0.06	0.3
(1,2064)	1:160:L:PRO:CG	1:161:L:PHE:CG	10	0.3	0.06	0.3
(1,2066)	1:204:J:ALA:CB	1:206:J:GLY:C	10	0.3	0.04	0.3
(1,2066)	1:204:L:ALA:CB	1:206:L:GLY:C	10	0.3	0.04	0.3
(1,2066)	1:204:K:ALA:CB	1:206:K:GLY:C	10	0.3	0.04	0.3
(1,2066)	1:204:G:ALA:CB	1:206:G:GLY:C	10	0.3	0.04	0.3
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	9	1.34	0.68	1.3
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	9	1.16	0.14	1.2
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE1	9	0.97	0.48	1.21
(1,601)	1:187:K:GLU:CA	1:169:K:TYR:CE2	9	0.97	0.48	1.21
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE2	9	0.97	0.48	1.21
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	9	0.94	0.61	0.7
(1,945)	1:172:H:LEU:CD1	1:153:H:ILE:CG1	9	0.68	0.23	0.66
(1,945)	1:172:I:LEU:CD1	1:153:I:ILE:CG1	9	0.68	0.23	0.66
(1,945)	1:172:L:LEU:CD1	1:153:L:ILE:CG1	9	0.68	0.23	0.66
(1,1621)	1:190:K:LEU:CD1	1:166:K:ASP:CA	9	0.68	0.12	0.76

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1621)	1:190:I:LEU:CD1	1:166:I:ASP:CA	9	0.68	0.12	0.76
(1,1621)	1:190:J:LEU:CD1	1:166:J:ASP:CA	9	0.68	0.12	0.76
(1,1621)	1:190:G:LEU:CD1	1:166:G:ASP:CA	9	0.68	0.12	0.76
(1,1621)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	9	0.68	0.12	0.76
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	9	0.66	0.34	0.75
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	9	0.66	0.34	0.75
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	9	0.62	0.28	0.57
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	9	0.58	0.27	0.64
(1,841)	1:174:J:ALA:CA	1:148:J:THR:CA	9	0.58	0.27	0.64
(1,841)	1:174:K:ALA:CA	1:148:K:THR:CA	9	0.58	0.27	0.64
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	9	0.58	0.23	0.58
(1,628)	1:151:J:LEU:CG	1:153:J:ILE:CB	9	0.56	0.24	0.55
(1,628)	1:151:I:LEU:CG	1:153:I:ILE:CB	9	0.56	0.24	0.55
(1,628)	1:151:K:LEU:CG	1:153:K:ILE:CB	9	0.56	0.24	0.55
(1,795)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CG	9	0.56	0.15	0.58
(1,795)	1:190:K:LEU:CG	1:187:K:GLU:CG	9	0.56	0.15	0.58
(1,795)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CG	9	0.56	0.15	0.58
(1,1384)	1:189:H:LEU:CA	1:153:H:ILE:C	9	0.55	0.2	0.51
(1,1384)	1:189:G:LEU:CA	1:153:G:ILE:C	9	0.55	0.2	0.51
(1,1384)	1:189:I:LEU:CA	1:153:I:ILE:C	9	0.55	0.2	0.51
(1,1384)	1:189:J:LEU:CA	1:153:J:ILE:C	9	0.55	0.2	0.51
(1,1384)	1:189:L:LEU:CA	1:153:L:ILE:C	9	0.55	0.2	0.51
(1,1384)	1:189:K:LEU:CA	1:153:K:ILE:C	9	0.55	0.2	0.51
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	9	0.52	0.38	0.38
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	9	0.49	0.12	0.56
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	9	0.45	0.27	0.4
(1,1141)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CG	9	0.42	0.21	0.38
(1,1141)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CG	9	0.42	0.21	0.38
(1,1141)	1:151:I:LEU:CG	1:189:I:LEU:CG	9	0.42	0.21	0.38
(1,1141)	1:151:K:LEU:CG	1:189:K:LEU:CG	9	0.42	0.21	0.38
(1,1141)	1:151:L:LEU:CG	1:189:L:LEU:CG	9	0.42	0.21	0.38
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	9	0.37	0.16	0.37
(1,920)	1:153:G:ILE:CD1	1:193:G:ASN:CG	9	0.32	0.12	0.33
(1,920)	1:153:H:ILE:CD1	1:193:H:ASN:CG	9	0.32	0.12	0.33
(1,920)	1:153:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	9	0.32	0.12	0.33
(1,920)	1:153:K:ILE:CD1	1:193:K:ASN:CG	9	0.32	0.12	0.33
(1,920)	1:153:I:ILE:CD1	1:193:I:ASN:CG	9	0.32	0.12	0.33
(1,1712)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	9	0.3	0.14	0.31
(1,1712)	1:172:G:LEU:CD1	1:183:G:ASN:CB	9	0.3	0.14	0.31
(1,1712)	1:172:H:LEU:CD1	1:183:H:ASN:CB	9	0.3	0.14	0.31
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	9	0.3	0.14	0.27
(1,1776)	1:205:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CA	9	0.3	0.14	0.27

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1776)	1:205:K:LEU:CD1	1:210:K:THR:CA	9	0.3	0.14	0.27
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	9	0.19	0.07	0.17
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	9	0.19	0.07	0.17
(1,1897)	1:238:L:VAL:CG1	1:241:L:THR:CA	8	1.08	0.22	1.14
(1,1897)	1:238:L:VAL:CG2	1:241:L:THR:CA	8	1.08	0.22	1.14
(1,1897)	1:238:H:VAL:CG2	1:241:H:THR:CA	8	1.08	0.22	1.14
(1,1897)	1:238:H:VAL:CG1	1:241:H:THR:CA	8	1.08	0.22	1.14
(1,1897)	1:238:J:VAL:CG1	1:241:K:THR:CA	8	1.08	0.22	1.14
(1,1897)	1:238:K:VAL:CG2	1:241:K:THR:CA	8	1.08	0.22	1.14
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	8	0.76	0.27	0.78
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	8	0.66	0.26	0.66
(1,878)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	8	0.64	0.41	0.5
(1,878)	1:187:I:GLU:CB	1:184:I:TRP:CZ3	8	0.64	0.41	0.5
(1,878)	1:187:L:GLU:CB	1:184:L:TRP:CZ3	8	0.64	0.41	0.5
(1,1736)	1:219:L:GLN:CB	1:160:L:PRO:CA	8	0.54	0.22	0.6
(1,1736)	1:219:K:GLN:CB	1:160:K:PRO:CA	8	0.54	0.22	0.6
(1,1736)	1:219:H:GLN:CB	1:160:H:PRO:CA	8	0.54	0.22	0.6
(1,1024)	1:189:J:LEU:CG	1:184:J:TRP:CD2	8	0.4	0.33	0.26
(1,1024)	1:189:G:LEU:CG	1:184:G:TRP:CD2	8	0.4	0.33	0.26
(1,1024)	1:189:L:LEU:CG	1:184:L:TRP:CD2	8	0.4	0.33	0.26
(1,1249)	1:190:K:LEU:CA	1:165:K:VAL:CA	8	0.39	0.14	0.44
(1,1249)	1:190:L:LEU:CA	1:165:L:VAL:CA	8	0.39	0.14	0.44
(1,1249)	1:190:H:LEU:CA	1:165:H:VAL:CA	8	0.39	0.14	0.44
(1,1249)	1:190:J:LEU:CA	1:165:J:VAL:CA	8	0.39	0.14	0.44
(1,1249)	1:190:G:LEU:CA	1:165:G:VAL:CA	8	0.39	0.14	0.44
(1,1111)	1:207:H:PRO:CG	1:202:H:LEU:CA	8	0.34	0.12	0.32
(1,1111)	1:207:K:PRO:CG	1:202:K:LEU:CA	8	0.34	0.12	0.32
(1,1111)	1:207:L:PRO:CG	1:202:L:LEU:CA	8	0.34	0.12	0.32
(1,1053)	1:211:L:LEU:CD2	1:190:L:LEU:C	8	0.33	0.07	0.34
(1,1053)	1:211:I:LEU:CD2	1:190:I:LEU:C	8	0.33	0.07	0.34
(1,1053)	1:211:J:LEU:CD2	1:190:J:LEU:C	8	0.33	0.07	0.34
(1,1877)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:C	8	0.32	0.18	0.25
(1,1877)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	8	0.32	0.18	0.25
(1,1877)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:C	8	0.32	0.18	0.25
(1,1877)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:C	8	0.32	0.18	0.25
(1,1782)	1:185:H:MET:CG	1:182:H:LYS:CE	8	0.31	0.08	0.32
(1,1782)	1:185:G:MET:CG	1:182:G:LYS:CE	8	0.31	0.08	0.32
(1,1782)	1:185:J:MET:CG	1:182:J:LYS:CE	8	0.31	0.08	0.32
(1,1782)	1:185:I:MET:CG	1:182:I:LYS:CE	8	0.31	0.08	0.32
(1,1342)	1:153:J:ILE:CD1	1:151:J:LEU:C	8	0.28	0.1	0.25
(1,1342)	1:153:K:ILE:CD1	1:151:K:LEU:C	8	0.28	0.1	0.25
(1,1342)	1:153:L:ILE:CD1	1:151:L:LEU:C	8	0.28	0.1	0.25

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1342)	1:153:G:ILE:CD1	1:151:G:LEU:C	8	0.28	0.1	0.25
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	8	0.28	0.15	0.27
(1,1922)	1:193:J:ASN:CB	1:188:J:THR:C	8	0.27	0.07	0.28
(1,1922)	1:193:I:ASN:CB	1:188:I:THR:C	8	0.27	0.07	0.28
(1,1922)	1:193:K:ASN:CB	1:188:K:THR:C	8	0.27	0.07	0.28
(1,1780)	1:217:H:ALA:CB	1:221:H:VAL:CG2	8	0.24	0.11	0.2
(1,1780)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	8	0.24	0.11	0.2
(1,1780)	1:217:J:ALA:CB	1:221:J:VAL:CG2	8	0.24	0.11	0.2
(1,2036)	1:190:J:LEU:CD1	1:194:J:ALA:C	8	0.19	0.07	0.16
(1,2036)	1:190:K:LEU:CD1	1:194:K:ALA:C	8	0.19	0.07	0.16
(1,2036)	1:190:I:LEU:CD1	1:194:I:ALA:C	8	0.19	0.07	0.16
(1,2036)	1:190:L:LEU:CD1	1:194:L:ALA:C	8	0.19	0.07	0.16
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	7	0.81	0.3	0.84
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	7	0.64	0.28	0.77
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	7	0.58	0.16	0.61
(1,505)	1:150:J:ILE:CG2	1:182:J:LYS:C	7	0.48	0.4	0.32
(1,505)	1:150:I:ILE:CG2	1:182:I:LYS:C	7	0.48	0.4	0.32
(1,505)	1:150:K:ILE:CG2	1:182:K:LYS:C	7	0.48	0.4	0.32
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	7	0.47	0.21	0.4
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	7	0.47	0.21	0.4
(1,1023)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	7	0.45	0.17	0.43
(1,1023)	1:165:K:VAL:CG2	1:163:K:ASP:CB	7	0.45	0.17	0.43
(1,1023)	1:165:L:VAL:CG2	1:163:L:ASP:CB	7	0.45	0.17	0.43
(1,796)	1:168:J:PHE:CB	1:189:J:LEU:CB	7	0.39	0.14	0.38
(1,796)	1:168:K:PHE:CB	1:189:K:LEU:CB	7	0.39	0.14	0.38
(1,796)	1:168:H:PHE:CB	1:189:H:LEU:CB	7	0.39	0.14	0.38
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	7	0.34	0.07	0.32
(1,1431)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CA	7	0.31	0.15	0.36
(1,1431)	1:201:J:ILE:CG2	1:197:J:ASP:CA	7	0.31	0.15	0.36
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	7	0.31	0.12	0.33
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	7	0.31	0.1	0.35
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	7	0.31	0.1	0.35
(1,1592)	1:153:H:ILE:CB	1:193:H:ASN:CA	7	0.29	0.08	0.27
(1,1592)	1:153:K:ILE:CB	1:193:K:ASN:CA	7	0.29	0.08	0.27
(1,1592)	1:153:I:ILE:CB	1:193:I:ASN:CA	7	0.29	0.08	0.27
(1,1359)	1:221:L:VAL:CG1	1:223:L:GLY:CA	7	0.28	0.09	0.28
(1,1359)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	7	0.28	0.09	0.28
(1,1359)	1:221:G:VAL:CG1	1:223:H:GLY:CA	7	0.28	0.09	0.28
(1,1359)	1:221:K:VAL:CG1	1:223:K:GLY:CA	7	0.28	0.09	0.28
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	7	0.26	0.08	0.28
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	7	0.24	0.13	0.18
(1,580)	1:211:L:LEU:CD1	1:212:L:GLU:CD	7	0.22	0.1	0.18

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,580)	1:211:H:LEU:CD1	1:212:H:GLU:CD	7	0.22	0.1	0.18
(1,580)	1:211:I:LEU:CD1	1:212:I:GLU:CD	7	0.22	0.1	0.18
(1,580)	1:211:K:LEU:CD1	1:212:K:GLU:CD	7	0.22	0.1	0.18
(1,1508)	1:190:H:LEU:CD1	1:161:H:PHE:CA	7	0.19	0.05	0.21
(1,1508)	1:190:K:LEU:CD1	1:161:K:PHE:CA	7	0.19	0.05	0.21
(1,1508)	1:190:J:LEU:CD1	1:161:J:PHE:CA	7	0.19	0.05	0.21
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12A	6	0.39	0.16	0.41
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12B	6	0.39	0.16	0.41
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ1	6	0.38	0.14	0.38
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ2	6	0.38	0.14	0.38
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ3	6	0.38	0.14	0.38
(1,719)	1:210:I:THR:CG2	1:211:I:LEU:CG	6	0.3	0.07	0.3
(1,719)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	6	0.3	0.07	0.3
(1,2292)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:F33	6	0.27	0.13	0.28
(1,475)	1:215:J:MET:CG	1:219:J:GLN:C	6	0.22	0.07	0.22
(1,475)	1:215:L:MET:CG	1:219:L:GLN:C	6	0.22	0.07	0.22
(1,475)	1:215:H:MET:CG	1:219:H:GLN:C	6	0.22	0.07	0.22
(1,475)	1:215:K:MET:CG	1:219:K:GLN:C	6	0.22	0.07	0.22
(1,570)	1:156:I:GLY:CA	1:196:I:PRO:CD	6	0.19	0.07	0.16
(1,570)	1:156:L:GLY:CA	1:196:L:PRO:CD	6	0.19	0.07	0.16
(1,570)	1:156:K:GLY:CA	1:196:K:PRO:CD	6	0.19	0.07	0.16
(1,570)	1:156:H:GLY:CA	1:196:H:PRO:CD	6	0.19	0.07	0.16
(1,1932)	1:153:K:ILE:CG1	1:193:K:ASN:CB	6	0.18	0.09	0.15
(1,1932)	1:153:H:ILE:CG1	1:193:H:ASN:CB	6	0.18	0.09	0.15
(1,1932)	1:153:I:ILE:CG1	1:193:I:ASN:CB	6	0.18	0.09	0.15
(1,506)	1:156:L:GLY:CA	1:164:L:TYR:CA	6	0.18	0.03	0.18
(1,506)	1:156:K:GLY:CA	1:164:K:TYR:CA	6	0.18	0.03	0.18
(1,506)	1:156:H:GLY:CA	1:164:H:TYR:CA	6	0.18	0.03	0.18
(1,506)	1:156:I:GLY:CA	1:164:I:TYR:CA	6	0.18	0.03	0.18
(1,1272)	1:160:K:PRO:CB	1:161:K:PHE:CD2	6	0.15	0.02	0.15
(1,1272)	1:160:I:PRO:CB	1:161:I:PHE:CD2	6	0.15	0.02	0.15
(1,1272)	1:160:J:PRO:CB	1:161:J:PHE:CD2	6	0.15	0.02	0.15
(1,1272)	1:160:G:PRO:CB	1:161:G:PHE:CD2	6	0.15	0.02	0.15
(1,2346)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:I:HIS:CA	5	1.22	0.57	1.35
(1,2342)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:I:GLY:CA	5	0.7	0.32	0.79
(1,900)	1:230:K:VAL:CG1	1:233:K:GLU:CD	5	0.64	0.23	0.66
(1,900)	1:230:J:VAL:CG1	1:233:J:GLU:CD	5	0.64	0.23	0.66
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9A	1:232:H:ALA:CA	5	0.56	0.33	0.43
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9B	1:232:H:ALA:CA	5	0.56	0.33	0.43
(1,1426)	1:150:J:ILE:CG2	1:190:J:LEU:CA	5	0.56	0.15	0.63
(1,1426)	1:150:I:ILE:CG2	1:190:I:LEU:CA	5	0.56	0.15	0.63
(1,484)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	5	0.5	0.22	0.51

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1518)	1:154:J:ARG:CG	1:151:J:LEU:CA	5	0.41	0.24	0.39
(1,1518)	1:154:G:ARG:CG	1:151:G:LEU:CA	5	0.41	0.24	0.39
(1,1518)	1:154:H:ARG:CG	1:151:H:LEU:CA	5	0.41	0.24	0.39
(1,1518)	1:154:K:ARG:CG	1:151:K:LEU:CA	5	0.41	0.24	0.39
(1,1910)	1:150:J:ILE:CG2	1:153:J:ILE:CG1	5	0.38	0.15	0.36
(1,1910)	1:150:I:ILE:CG2	1:153:I:ILE:CG1	5	0.38	0.15	0.36
(1,1348)	1:197:K:ASP:CB	1:218:K:CYS:CA	5	0.33	0.07	0.38
(1,1348)	1:197:G:ASP:CB	1:218:G:CYS:CA	5	0.33	0.07	0.38
(1,1348)	1:197:I:ASP:CB	1:218:I:CYS:CA	5	0.33	0.07	0.38
(1,1348)	1:197:J:ASP:CB	1:218:J:CYS:CA	5	0.33	0.07	0.38
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	5	0.32	0.19	0.22
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	5	0.32	0.19	0.22
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	5	0.32	0.19	0.22
(1,1976)	1:148:I:THR:CA	1:174:I:ALA:C	5	0.3	0.11	0.31
(1,1976)	1:148:K:THR:CA	1:174:K:ALA:C	5	0.3	0.11	0.31
(1,1976)	1:148:J:THR:CA	1:174:J:ALA:C	5	0.3	0.11	0.31
(1,2352)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CB	5	0.3	0.14	0.2
(1,1841)	1:172:J:LEU:CG	1:183:J:ASN:CA	5	0.29	0.12	0.26
(1,1841)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	5	0.29	0.12	0.26
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ1	5	0.25	0.19	0.12
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ2	5	0.25	0.19	0.12
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ3	5	0.25	0.19	0.12
(1,1337)	1:197:I:ASP:CB	1:222:I:GLY:C	5	0.24	0.14	0.16
(1,1337)	1:197:K:ASP:CB	1:222:K:GLY:C	5	0.24	0.14	0.16
(1,1337)	1:197:J:ASP:CB	1:222:J:GLY:C	5	0.24	0.14	0.16
(1,2206)	1:219:I:GLN:CG	1:195:H:ASN:CA	5	0.22	0.08	0.19
(1,2410)	3:302:H:A1CCY:F32	1:221:H:VAL:CA	5	0.21	0.07	0.18
(1,547)	1:190:H:LEU:CG	1:164:H:TYR:CB	5	0.2	0.05	0.22
(1,547)	1:190:J:LEU:CG	1:164:J:TYR:CB	5	0.2	0.05	0.22
(1,547)	1:190:I:LEU:CG	1:164:I:TYR:CB	5	0.2	0.05	0.22
(1,1945)	1:165:J:VAL:CB	1:211:J:LEU:CB	5	0.2	0.05	0.18
(1,1945)	1:165:I:VAL:CB	1:211:I:LEU:CB	5	0.2	0.05	0.18
(1,1404)	1:158:H:LYS:CD	1:159:H:GLU:CD	5	0.19	0.06	0.15
(1,1404)	1:158:I:LYS:CD	1:159:I:GLU:CD	5	0.19	0.06	0.15
(1,742)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	5	0.17	0.05	0.19
(1,742)	1:202:J:LEU:CG	1:194:J:ALA:CA	5	0.17	0.05	0.19
(1,742)	1:202:H:LEU:CG	1:194:H:ALA:CA	5	0.17	0.05	0.19
(1,742)	1:202:K:LEU:CG	1:194:K:ALA:CA	5	0.17	0.05	0.19
(1,770)	1:155:G:GLN:CG	1:196:G:PRO:CD	5	0.13	0.02	0.13
(1,770)	1:155:J:GLN:CG	1:196:J:PRO:CD	5	0.13	0.02	0.13
(1,770)	1:155:H:GLN:CG	1:196:H:PRO:CD	5	0.13	0.02	0.13
(1,770)	1:155:L:GLN:CG	1:196:L:PRO:CD	5	0.13	0.02	0.13

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,2347)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:I:HIS:CA	4	0.82	0.31	0.97
(1,2341)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:I:GLY:CA	4	0.73	0.09	0.76
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ1	4	0.62	0.28	0.48
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ2	4	0.62	0.28	0.48
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ3	4	0.62	0.28	0.48
(1,865)	1:240:H:ASN:CB	1:237:H:GLN:CA	4	0.57	0.22	0.56
(1,865)	1:240:L:ASN:CB	1:237:L:GLN:CA	4	0.57	0.22	0.56
(1,865)	1:240:K:ASN:CB	1:237:K:GLN:CA	4	0.57	0.22	0.56
(1,2404)	3:302:H:A1CCY:F32	1:222:H:GLY:CA	4	0.31	0.19	0.26
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9A	4	0.31	0.07	0.32
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9B	4	0.31	0.07	0.32
(1,2106)	1:150:I:ILE:CG1	1:175:I:GLU:CB	4	0.23	0.08	0.22
(1,2106)	1:150:L:ILE:CG1	1:175:L:GLU:CB	4	0.23	0.08	0.22
(1,2129)	1:195:H:ASN:CA	1:219:I:GLN:CA	4	0.23	0.08	0.23
(1,1327)	1:153:L:ILE:CG1	1:148:L:THR:CB	4	0.21	0.02	0.2
(1,1327)	1:153:J:ILE:CG1	1:148:J:THR:CB	4	0.21	0.02	0.2
(1,1725)	1:214:H:MET:CG	1:207:H:PRO:CA	4	0.2	0.05	0.2
(1,1725)	1:214:K:MET:CG	1:207:K:PRO:CA	4	0.2	0.05	0.2
(1,1725)	1:214:L:MET:CG	1:207:L:PRO:CA	4	0.2	0.05	0.2
(1,2143)	1:156:J:GLY:CA	1:160:K:PRO:CD	4	0.2	0.05	0.22
(1,1943)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CB	4	0.17	0.06	0.16
(1,1197)	1:185:H:MET:CE	1:189:H:LEU:CG	4	0.16	0.04	0.16
(1,1197)	1:185:G:MET:CE	1:189:G:LEU:CG	4	0.16	0.04	0.16
(1,2343)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:I:LYS:CA	4	0.16	0.05	0.16
(1,1707)	1:190:L:LEU:CD1	1:202:L:LEU:CG	4	0.15	0.05	0.13
(1,1707)	1:190:I:LEU:CD1	1:202:I:LEU:CG	4	0.15	0.05	0.13
(1,1707)	1:190:J:LEU:CD1	1:202:J:LEU:CG	4	0.15	0.05	0.13
(1,115)	1:194:L:ALA:N	1:153:L:ILE:CG2	4	0.15	0.03	0.15
(1,115)	1:194:H:ALA:N	1:153:H:ILE:CG2	4	0.15	0.03	0.15
(1,115)	1:194:I:ALA:N	1:153:I:ILE:CG2	4	0.15	0.03	0.15
(1,115)	1:194:K:ALA:N	1:153:K:ILE:CG2	4	0.15	0.03	0.15
(1,2399)	3:302:H:A1CCY:F33	1:157:H:PRO:CG	3	0.61	0.12	0.64
(1,1491)	1:238:H:VAL:CG2	1:244:H:ILE:CB	3	0.57	0.16	0.59
(1,1491)	1:238:L:VAL:CG2	1:244:L:ILE:CB	3	0.57	0.16	0.59
(1,1491)	1:238:L:VAL:CG1	1:244:L:ILE:CB	3	0.57	0.16	0.59
(1,1515)	1:150:J:ILE:CD1	1:167:J:ARG:CA	3	0.55	0.32	0.6
(1,1515)	1:150:K:ILE:CD1	1:167:K:ARG:CA	3	0.55	0.32	0.6
(1,2235)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	3	0.5	0.1	0.52
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD2	3	0.44	0.05	0.46
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD3	3	0.44	0.05	0.46
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12A	1:232:I:ALA:CA	3	0.42	0.0	0.42
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12B	1:232:I:ALA:CA	3	0.42	0.0	0.42

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,2161)	1:223:H:GLY:CA	1:157:G:PRO:CD	3	0.38	0.21	0.24
(1,2365)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:H:GLY:CA	3	0.32	0.05	0.31
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD2	3	0.32	0.12	0.35
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD3	3	0.32	0.12	0.35
(1,1321)	1:153:I:ILE:CG2	1:164:I:TYR:CA	3	0.28	0.1	0.23
(1,1321)	1:153:J:ILE:CG2	1:164:J:TYR:CA	3	0.28	0.1	0.23
(1,1321)	1:153:K:ILE:CG2	1:164:K:TYR:CA	3	0.28	0.1	0.23
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD2	3	0.28	0.02	0.3
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD3	3	0.28	0.02	0.3
(1,716)	1:194:J:ALA:CB	1:154:J:ARG:CG	3	0.27	0.19	0.17
(1,716)	1:194:K:ALA:CB	1:154:K:ARG:CG	3	0.27	0.19	0.17
(1,716)	1:194:I:ALA:CB	1:154:I:ARG:CG	3	0.27	0.19	0.17
(1,614)	1:161:K:PHE:CD1	1:165:K:VAL:C	3	0.25	0.12	0.22
(1,614)	1:161:I:PHE:CD1	1:165:I:VAL:C	3	0.25	0.12	0.22
(1,614)	1:161:L:PHE:CD1	1:165:L:VAL:C	3	0.25	0.12	0.22
(1,751)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	3	0.25	0.08	0.27
(1,751)	1:202:K:LEU:CD1	1:199:K:LYS:CD	3	0.25	0.08	0.27
(1,1299)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CB	3	0.23	0.06	0.25
(1,1299)	1:172:H:LEU:CD1	1:189:H:LEU:CB	3	0.23	0.06	0.25
(1,1166)	1:191:H:VAL:CG1	1:193:H:ASN:CA	3	0.22	0.03	0.22
(1,1310)	1:150:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	3	0.22	0.11	0.16
(1,1310)	1:150:H:ILE:CD1	1:193:H:ASN:CG	3	0.22	0.11	0.16
(1,467)	1:153:J:ILE:CG2	1:167:J:ARG:CG	3	0.2	0.09	0.14
(1,467)	1:153:K:ILE:CG2	1:167:K:ARG:CG	3	0.2	0.09	0.14
(1,1796)	1:162:G:ARG:CG	1:161:G:PHE:CD1	3	0.2	0.05	0.17
(1,1796)	1:162:H:ARG:CG	1:161:H:PHE:CD1	3	0.2	0.05	0.17
(1,1796)	1:162:L:ARG:CG	1:161:L:PHE:CD1	3	0.2	0.05	0.17
(1,729)	1:150:J:ILE:CD1	1:190:J:LEU:CD1	3	0.2	0.07	0.21
(1,729)	1:150:H:ILE:CD1	1:190:H:LEU:CD1	3	0.2	0.07	0.21
(1,729)	1:150:L:ILE:CD1	1:190:L:LEU:CD1	3	0.2	0.07	0.21
(1,1676)	1:217:L:ALA:CB	1:215:L:MET:CB	3	0.19	0.05	0.21
(1,1676)	1:217:H:ALA:CB	1:215:H:MET:CB	3	0.19	0.05	0.21
(1,1676)	1:217:G:ALA:CB	1:215:G:MET:CB	3	0.19	0.05	0.21
(1,1112)	1:191:H:VAL:CG1	1:194:H:ALA:C	3	0.19	0.04	0.16
(1,859)	1:171:G:THR:CA	1:168:G:PHE:CG	3	0.19	0.03	0.19
(1,859)	1:171:I:THR:CA	1:168:I:PHE:CG	3	0.19	0.03	0.19
(1,2374)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:H:LYS:CA	3	0.18	0.05	0.17
(1,898)	1:201:K:ILE:CD1	1:161:K:PHE:CD1	3	0.17	0.04	0.19
(1,898)	1:201:J:ILE:CD1	1:161:J:PHE:CD1	3	0.17	0.04	0.19
(1,699)	1:177:J:ALA:CB	1:172:J:LEU:CG	3	0.16	0.02	0.17
(1,699)	1:177:L:ALA:CB	1:172:L:LEU:CG	3	0.16	0.02	0.17
(1,758)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CD2	3	0.16	0.01	0.17

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median
(1,1397)	1:175:J:GLU:CB	1:148:J:THR:CB	3	0.16	0.06	0.13
(1,1035)	1:187:L:GLU:CB	1:184:L:TRP:CE2	3	0.14	0.02	0.14
(1,1035)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	3	0.14	0.02	0.14
(1,2027)	1:189:L:LEU:CB	1:153:L:ILE:CA	3	0.14	0.02	0.15
(1,2027)	1:189:K:LEU:CB	1:153:K:ILE:CA	3	0.14	0.02	0.15
(1,2027)	1:189:G:LEU:CB	1:153:G:ILE:CA	3	0.14	0.02	0.15
(1,1691)	1:218:H:CYS:CB	1:226:H:HIS:CD2	3	0.14	0.01	0.14
(1,1691)	1:218:G:CYS:CB	1:226:G:HIS:CD2	3	0.14	0.01	0.14
(1,1232)	1:218:J:CYS:CB	1:197:J:ASP:CB	3	0.13	0.0	0.13
(1,1232)	1:218:I:CYS:CB	1:197:I:ASP:CB	3	0.13	0.0	0.13
(1,1636)	1:171:K:THR:CG2	1:175:K:GLU:CA	3	0.12	0.01	0.12
(1,1636)	1:171:I:THR:CG2	1:175:I:GLU:CA	3	0.12	0.01	0.12
(1,739)	1:152:G:ASP:CB	1:148:G:THR:CB	2	1.42	0.03	1.42
(1,708)	1:151:K:LEU:CD1	1:153:K:ILE:CB	2	0.74	0.63	0.74
(1,708)	1:151:I:LEU:CD1	1:153:I:ILE:CB	2	0.74	0.63	0.74
(1,509)	1:149:G:SER:CA	1:152:G:ASP:CG	2	0.4	0.15	0.4
(1,1415)	1:152:L:ASP:CA	1:149:L:SER:CA	2	0.35	0.04	0.35
(1,2142)	1:156:I:GLY:CA	1:160:J:PRO:CD	2	0.33	0.1	0.33
(1,850)	1:150:J:ILE:CG1	1:171:J:THR:CA	2	0.31	0.13	0.31
(1,848)	1:189:J:LEU:CG	1:151:J:LEU:CB	2	0.26	0.0	0.26
(1,848)	1:189:I:LEU:CG	1:151:I:LEU:CB	2	0.26	0.0	0.26
(1,718)	1:161:K:PHE:CD2	1:165:K:VAL:C	2	0.25	0.14	0.25
(1,718)	1:161:J:PHE:CD2	1:165:J:VAL:C	2	0.25	0.14	0.25
(1,2202)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	2	0.24	0.1	0.24
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ1	2	0.24	0.04	0.24
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ2	2	0.24	0.04	0.24
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ3	2	0.24	0.04	0.24
(1,798)	1:150:I:ILE:CD1	1:151:I:LEU:CD1	2	0.23	0.07	0.23
(1,2393)	3:302:H:A1CCY:H12A	1:232:H:ALA:CB	2	0.22	0.04	0.22
(1,2393)	3:302:H:A1CCY:H12B	1:232:H:ALA:CB	2	0.22	0.04	0.22
(1,1742)	1:180:G:GLU:CG	1:184:G:TRP:CA	2	0.21	0.05	0.21
(1,1742)	1:180:K:GLU:CG	1:184:K:TRP:CA	2	0.21	0.05	0.21
(1,2330)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F33	2	0.19	0.03	0.19
(1,905)	1:155:I:GLN:CG	1:165:I:VAL:CA	2	0.18	0.04	0.18
(1,905)	1:155:L:GLN:CG	1:165:L:VAL:CA	2	0.18	0.04	0.18
(1,2141)	1:156:H:GLY:CA	1:160:I:PRO:CD	2	0.18	0.02	0.18
(1,1086)	1:217:H:ALA:CB	1:213:H:GLU:CG	2	0.16	0.06	0.16
(1,1086)	1:217:L:ALA:CB	1:213:L:GLU:CG	2	0.16	0.06	0.16
(1,749)	1:211:I:LEU:CD1	1:169:I:TYR:CD2	2	0.16	0.0	0.16
(1,2370)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CA	2	0.16	0.03	0.16
(1,2307)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F33	2	0.15	0.04	0.15
(1,2154)	1:219:J:GLN:CG	1:155:I:GLN:CA	2	0.14	0.03	0.14

Continued on next page

Continued from previous page...

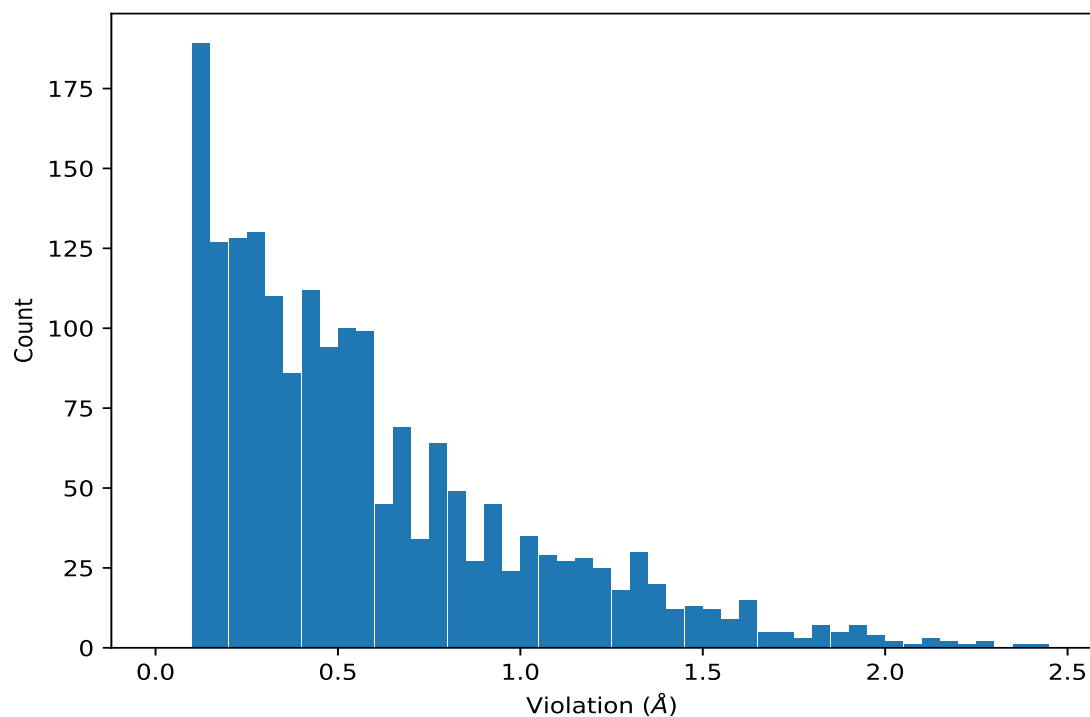
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1148)	1:205:L:LEU:CG	1:218:L:CYS:CA	2	0.14	0.04	0.14
(1,1148)	1:205:J:LEU:CG	1:218:J:CYS:CA	2	0.14	0.04	0.14
(1,2160)	1:223:I:GLY:CA	1:157:H:PRO:CD	2	0.14	0.04	0.14
(1,1376)	1:183:J:ASN:CA	1:178:J:SER:C	2	0.13	0.03	0.13
(1,1376)	1:183:L:ASN:CA	1:178:L:SER:C	2	0.13	0.03	0.13
(1,982)	1:150:J:ILE:CD1	1:186:J:THR:CB	2	0.12	0.02	0.12
(1,1108)	1:172:L:LEU:CG	1:169:L:TYR:CZ	2	0.12	0.01	0.12
(1,1108)	1:172:J:LEU:CG	1:169:J:TYR:CZ	2	0.12	0.01	0.12
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22A	2	0.12	0.02	0.12
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22B	2	0.12	0.02	0.12
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22C	2	0.12	0.02	0.12

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations [i](#)

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



9.5.2 Table : All distance violations [i](#)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	7	2.44
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	8	2.37
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	3	2.3
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	7	2.25
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	8	2.23
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	5	2.17
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	9	2.15
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	2	2.13
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	4	2.13
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	10	2.12
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	2	2.09
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	5	2.04
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	3	2.02
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	10	1.98
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	7	1.98
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	6	1.98
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	5	1.97
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	2	1.95
(1,1892)	1:152:G:ASP:CB	1:149:G:SER:CB	2	1.95
(1,1469)	1:171:G:THR:CG2	1:152:G:ASP:CB	2	1.95
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	2	1.93
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	8	1.92
(1,1242)	1:238:I:VAL:CG1	1:243:I:THR:CA	6	1.92
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	2	1.91
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	6	1.87
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	2	1.87
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	5	1.86
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	4	1.85
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	4	1.85
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	7	1.84
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	5	1.83
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	7	1.81
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	3	1.81
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	3	1.8
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	5	1.8
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	7	1.8
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	2	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	2	1.78
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	8	1.76
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	5	1.74
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	1	1.74
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	9	1.73
(1,1469)	1:171:K:THR:CG2	1:152:K:ASP:CB	9	1.73
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	6	1.71
(1,1469)	1:171:H:THR:CG2	1:152:H:ASP:CB	5	1.69
(1,2346)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:I:HIS:CA	8	1.68
(1,1469)	1:171:G:THR:CG2	1:152:G:ASP:CB	6	1.68
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	6	1.67
(1,1469)	1:171:L:THR:CG2	1:152:L:ASP:CB	8	1.66
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	10	1.65
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE2	6	1.65
(1,501)	1:154:G:ARG:CG	1:192:G:GLN:CA	3	1.65
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	10	1.64
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	3	1.64
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	4	1.64
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	10	1.64
(1,878)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	4	1.64
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	5	1.63
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	6	1.63
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	7	1.62
(1,2346)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:I:HIS:CA	9	1.62
(1,1892)	1:152:H:ASP:CB	1:149:H:SER:CB	8	1.62
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	8	1.61
(1,1784)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CB	2	1.61
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	6	1.57
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	3	1.57
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	7	1.56
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	7	1.56
(1,1907)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:CG2	10	1.56
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	3	1.55
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	4	1.55
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	5	1.55
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	9	1.55
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	5	1.54
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	10	1.54
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	3	1.54
(1,1646)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:CB	8	1.53
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	8	1.52
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	8	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	4	1.51
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	9	1.5
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	5	1.5
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	10	1.5
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	9	1.5
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	10	1.5
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	8	1.49
(1,1646)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:CB	5	1.49
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	9	1.48
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	3	1.48
(1,1646)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:CB	3	1.48
(1,551)	1:150:J:ILE:CA	1:164:J:TYR:CZ	2	1.48
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	9	1.47
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	1	1.46
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	3	1.46
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	5	1.46
(1,1892)	1:152:H:ASP:CB	1:149:H:SER:CB	5	1.46
(1,1646)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:CB	10	1.46
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	5	1.46
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	7	1.45
(1,1784)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CB	8	1.45
(1,739)	1:152:G:ASP:CB	1:148:G:THR:CB	2	1.45
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	2	1.44
(1,1304)	1:157:L:PRO:CG	1:197:L:ASP:CB	4	1.44
(1,505)	1:150:J:ILE:CG2	1:182:J:LYS:C	10	1.44
(1,1784)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CB	5	1.43
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	9	1.43
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	9	1.42
(1,1304)	1:157:I:PRO:CG	1:197:I:ASP:CB	6	1.42
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	5	1.41
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	5	1.41
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	7	1.4
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	5	1.4
(1,1469)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	3	1.4
(1,501)	1:154:L:ARG:CG	1:192:L:GLN:CA	8	1.4
(1,916)	1:163:I:ASP:CB	1:161:I:PHE:CG	9	1.39
(1,739)	1:152:G:ASP:CB	1:148:G:THR:CB	6	1.39
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	1	1.38
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	1	1.38
(1,1304)	1:157:K:PRO:CG	1:197:K:ASP:CB	2	1.38
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	1	1.37
(1,1304)	1:157:K:PRO:CG	1:197:K:ASP:CB	1	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	8	1.37
(1,916)	1:163:I:ASP:CB	1:161:I:PHE:CG	1	1.37
(1,708)	1:151:I:LEU:CD1	1:153:I:ILE:CB	7	1.37
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	8	1.36
(1,601)	1:187:K:GLU:CA	1:169:K:TYR:CE2	2	1.36
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	4	1.35
(1,2346)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:I:HIS:CA	1	1.35
(1,2346)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:I:HIS:CA	10	1.35
(1,916)	1:163:J:ASP:CB	1:161:J:PHE:CG	7	1.35
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	8	1.34
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	9	1.34
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	6	1.34
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	6	1.33
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	9	1.33
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	9	1.33
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	9	1.33
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	3	1.33
(1,1897)	1:238:L:VAL:CG2	1:241:L:THR:CA	2	1.33
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	10	1.33
(1,1107)	1:150:K:ILE:CG2	1:168:K:PHE:C	7	1.33
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	6	1.32
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	2	1.32
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	7	1.32
(1,1469)	1:171:L:THR:CG2	1:152:L:ASP:CB	4	1.32
(1,601)	1:187:K:GLU:CA	1:169:K:TYR:CE2	5	1.32
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	3	1.31
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	6	1.31
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	2	1.31
(1,2345)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CA	10	1.31
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	5	1.31
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	7	1.31
(1,2364)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:H:GLY:CA	9	1.3
(1,2358)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CB	1	1.3
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	3	1.3
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	5	1.3
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	5	1.3
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	5	1.3
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	10	1.3
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	1	1.3
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	1	1.29
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	8	1.29
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	2	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	8	1.29
(1,916)	1:163:K:ASP:CB	1:161:K:PHE:CG	5	1.29
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	1	1.28
(1,551)	1:150:J:ILE:CA	1:164:J:TYR:CZ	6	1.28
(2,122)	3:302:H:A1CCY:H28	1:197:H:ASP:N	4	1.27
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	1	1.27
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	3	1.27
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	1	1.27
(1,551)	1:150:L:ILE:CA	1:164:L:TYR:CZ	3	1.27
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	4	1.26
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	2	1.26
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	9	1.26
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	2	1.25
(1,1304)	1:157:K:PRO:CG	1:197:K:ASP:CB	10	1.25
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	10	1.25
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	5	1.24
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	8	1.24
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	7	1.24
(1,1897)	1:238:L:VAL:CG1	1:241:L:THR:CA	1	1.24
(1,1551)	1:174:L:ALA:CB	1:182:L:LYS:CE	8	1.24
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	2	1.24
(1,916)	1:163:L:ASP:CB	1:161:L:PHE:CG	6	1.24
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	4	1.23
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	7	1.23
(1,1897)	1:238:H:VAL:CG1	1:241:H:THR:CA	4	1.23
(1,1892)	1:152:I:ASP:CB	1:149:I:SER:CB	3	1.23
(1,1784)	1:151:K:LEU:CG	1:189:K:LEU:CB	9	1.23
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	2	1.22
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	7	1.22
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	5	1.22
(1,1892)	1:152:K:ASP:CB	1:149:K:SER:CB	1	1.22
(1,1784)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CB	6	1.22
(1,1646)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CB	4	1.22
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE2	7	1.22
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	8	1.21
(1,1892)	1:152:K:ASP:CB	1:149:K:SER:CB	9	1.21
(1,1304)	1:157:I:PRO:CG	1:197:I:ASP:CB	9	1.21
(1,1024)	1:189:G:LEU:CG	1:184:G:TRP:CD2	4	1.21
(1,916)	1:163:K:ASP:CB	1:161:K:PHE:CG	10	1.21
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE2	9	1.21
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	4	1.2
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	8	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	3	1.2
(1,1892)	1:152:L:ASP:CB	1:149:L:SER:CB	6	1.2
(1,1784)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CB	1	1.2
(1,1784)	1:151:L:LEU:CG	1:189:L:LEU:CB	10	1.2
(1,1304)	1:157:K:PRO:CG	1:197:K:ASP:CB	3	1.2
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	6	1.19
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	5	1.19
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	5	1.19
(1,916)	1:163:I:ASP:CB	1:161:I:PHE:CG	3	1.19
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	9	1.18
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	8	1.18
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	3	1.18
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	7	1.18
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	8	1.18
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	1	1.18
(1,1784)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CB	3	1.18
(1,1206)	1:172:H:LEU:CD1	1:189:H:LEU:CG	4	1.18
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	6	1.17
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	8	1.17
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	8	1.17
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	9	1.17
(1,1897)	1:238:H:VAL:CG1	1:241:H:THR:CA	8	1.17
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	7	1.17
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	2	1.16
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	8	1.16
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	4	1.16
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	3	1.15
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	4	1.15
(1,1191)	1:221:K:VAL:CG1	1:230:K:VAL:CG2	6	1.15
(1,916)	1:163:I:ASP:CB	1:161:I:PHE:CG	2	1.15
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	2	1.14
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	6	1.14
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	3	1.14
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	10	1.13
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	5	1.12
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	4	1.12
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	10	1.12
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	3	1.12
(1,1897)	1:238:K:VAL:CG2	1:241:K:THR:CA	7	1.12
(1,1231)	1:165:L:VAL:CG2	1:159:L:GLU:CD	4	1.12
(1,551)	1:150:H:ILE:CA	1:164:H:TYR:CZ	8	1.12
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	9	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	10	1.11
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ1	3	1.11
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ2	3	1.11
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ3	3	1.11
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	8	1.11
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	1	1.1
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	5	1.1
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	8	1.1
(1,1897)	1:238:L:VAL:CG2	1:241:L:THR:CA	9	1.1
(1,1646)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CB	9	1.1
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	7	1.1
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	2	1.09
(1,2342)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:I:GLY:CA	3	1.09
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	9	1.08
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	10	1.08
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	7	1.08
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	3	1.08
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	7	1.08
(1,2339)	3:302:H:A1CCY:F33	1:220:I:GLY:CA	6	1.08
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	1	1.08
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	1	1.08
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	1	1.08
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	9	1.08
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	8	1.08
(1,916)	1:163:L:ASP:CB	1:161:L:PHE:CG	4	1.08
(1,628)	1:151:J:LEU:CG	1:153:J:ILE:CB	7	1.08
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	3	1.07
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	6	1.07
(1,2400)	3:302:H:A1CCY:F31	1:196:H:PRO:CA	6	1.06
(1,2347)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:I:HIS:CA	8	1.06
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	2	1.06
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	2	1.06
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	10	1.06
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	6	1.06
(1,1784)	1:151:I:LEU:CG	1:189:I:LEU:CB	7	1.06
(1,945)	1:172:L:LEU:CD1	1:153:L:ILE:CG1	9	1.06
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	4	1.05
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	1	1.05
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	7	1.05
(1,2054)	1:155:K:GLN:CB	1:197:K:ASP:CB	10	1.05
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	1	1.04
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	9	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	8	1.04
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	1	1.04
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	6	1.04
(1,1845)	1:194:I:ALA:CA	1:197:I:ASP:CA	1	1.04
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	8	1.04
(1,1646)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CB	1	1.04
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	10	1.04
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	3	1.03
(1,2347)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:I:HIS:CA	9	1.03
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	2	1.03
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	5	1.03
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	6	1.03
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	6	1.03
(1,1107)	1:150:J:ILE:CG2	1:168:J:PHE:C	10	1.03
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	7	1.02
(1,1646)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:CB	7	1.02
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	4	1.01
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	5	1.01
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	10	1.01
(1,841)	1:174:K:ALA:CA	1:148:K:THR:CA	7	1.01
(1,744)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	3	1.01
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9A	1:232:H:ALA:CA	8	1.0
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9B	1:232:H:ALA:CA	8	1.0
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	6	1.0
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	2	1.0
(1,2351)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CA	9	1.0
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	1	1.0
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	8	1.0
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	3	1.0
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	9	1.0
(1,1892)	1:152:I:ASP:CB	1:149:I:SER:CB	10	1.0
(1,1646)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:CB	6	1.0
(1,916)	1:163:I:ASP:CB	1:161:I:PHE:CG	8	1.0
(1,501)	1:154:L:ARG:CG	1:192:L:GLN:CA	1	0.99
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	6	0.99
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	9	0.98
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	3	0.98
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	7	0.98
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	5	0.98
(1,1845)	1:194:I:ALA:CA	1:197:I:ASP:CA	2	0.98
(1,1469)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	10	0.98
(1,1304)	1:157:K:PRO:CG	1:197:K:ASP:CB	8	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	1	0.97
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	6	0.97
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	10	0.97
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	4	0.97
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	5	0.97
(1,1845)	1:194:I:ALA:CA	1:197:I:ASP:CA	3	0.97
(1,1845)	1:194:I:ALA:CA	1:197:I:ASP:CA	6	0.97
(1,1474)	1:167:H:ARG:CB	1:169:H:TYR:CD1	5	0.97
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	3	0.97
(1,1191)	1:221:J:VAL:CG1	1:230:J:VAL:CG2	1	0.97
(1,1191)	1:221:L:VAL:CG2	1:230:L:VAL:CG2	3	0.97
(1,2377)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CA	3	0.96
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	5	0.96
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	9	0.96
(1,487)	1:165:G:VAL:CG2	1:202:G:LEU:CG	2	0.96
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	9	0.95
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	10	0.95
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	8	0.95
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	1	0.95
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	7	0.95
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	7	0.95
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	8	0.95
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	4	0.95
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	5	0.95
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	3	0.94
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	7	0.94
(1,1907)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:CG2	7	0.94
(1,1845)	1:194:G:ALA:CA	1:197:G:ASP:CA	9	0.94
(1,1845)	1:194:K:ALA:CA	1:197:K:ASP:CA	10	0.94
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	6	0.93
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	3	0.93
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	10	0.93
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	10	0.93
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	9	0.93
(1,1008)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	8	0.93
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE2	4	0.93
(1,551)	1:150:L:ILE:CA	1:164:L:TYR:CZ	1	0.93
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	2	0.92
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	9	0.92
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	8	0.92
(1,744)	1:201:K:ILE:CG2	1:197:K:ASP:CB	7	0.92
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	2	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9A	1:232:H:ALA:CA	10	0.91
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9B	1:232:H:ALA:CA	10	0.91
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	1	0.91
(1,2347)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:I:HIS:CA	1	0.91
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	3	0.91
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	3	0.91
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	3	0.91
(1,2006)	1:175:L:GLU:CB	1:185:L:MET:CB	7	0.91
(1,1515)	1:150:K:ILE:CD1	1:167:K:ARG:CA	7	0.91
(1,1474)	1:167:H:ARG:CB	1:169:H:TYR:CD1	3	0.91
(1,1469)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	1	0.91
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	9	0.91
(1,900)	1:230:J:VAL:CG1	1:233:J:GLU:CD	6	0.91
(1,823)	1:177:L:ALA:CB	1:185:L:MET:CA	2	0.91
(1,501)	1:154:K:ARG:CG	1:192:K:GLN:CA	7	0.91
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	4	0.9
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	3	0.9
(1,551)	1:150:H:ILE:CA	1:164:H:TYR:CZ	7	0.9
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	4	0.89
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	7	0.89
(1,2294)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:F32	10	0.89
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	1	0.89
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	1	0.89
(1,1474)	1:167:J:ARG:CB	1:169:J:TYR:CD1	2	0.89
(1,1474)	1:167:H:ARG:CB	1:169:H:TYR:CD1	7	0.89
(1,945)	1:172:I:LEU:CD1	1:153:I:ILE:CG1	7	0.89
(1,551)	1:150:L:ILE:CA	1:164:L:TYR:CZ	10	0.89
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	5	0.88
(1,1008)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	5	0.88
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	8	0.88
(1,744)	1:201:L:ILE:CG2	1:197:L:ASP:CB	5	0.88
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	5	0.87
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	7	0.87
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	9	0.87
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	1	0.87
(1,1845)	1:194:I:ALA:CA	1:197:I:ASP:CA	5	0.87
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	3	0.87
(1,945)	1:172:L:LEU:CD1	1:153:L:ILE:CG1	8	0.87
(1,900)	1:230:K:VAL:CG1	1:233:K:GLU:CD	1	0.87
(1,484)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	9	0.87
(1,2388)	3:302:H:A1CCY:H11	1:232:H:ALA:CA	4	0.86
(1,1897)	1:238:J:VAL:CG1	1:241:K:THR:CA	5	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1733)	1:201:L:ILE:CG1	1:214:L:MET:CA	8	0.86
(1,744)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	2	0.86
(1,487)	1:165:I:VAL:CG2	1:202:I:LEU:CG	5	0.86
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	2	0.85
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	2	0.85
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	1	0.85
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	8	0.85
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	2	0.85
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	7	0.85
(1,2231)	2:301:H:IHP:P6	1:158:J:LYS:HA	2	0.85
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	10	0.85
(1,1191)	1:221:J:VAL:CG1	1:230:J:VAL:CG2	4	0.85
(1,487)	1:165:J:VAL:CG2	1:202:J:LEU:CG	7	0.85
(1,2378)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CA	3	0.84
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	7	0.84
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	9	0.84
(1,1679)	1:191:I:VAL:CG1	1:198:I:CYS:CA	1	0.84
(1,1529)	1:192:G:GLN:CA	1:164:G:TYR:CZ	8	0.84
(1,1357)	1:235:L:MET:CB	1:230:L:VAL:CA	8	0.84
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	5	0.84
(1,865)	1:240:L:ASN:CB	1:237:L:GLN:CA	2	0.84
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	10	0.83
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	4	0.83
(1,2341)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:I:GLY:CA	2	0.83
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	6	0.83
(1,1679)	1:191:G:VAL:CG1	1:198:G:CYS:CA	4	0.83
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	7	0.83
(1,487)	1:165:G:VAL:CG2	1:202:G:LEU:CG	6	0.83
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	2	0.82
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	4	0.82
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	10	0.82
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	10	0.82
(1,1845)	1:194:I:ALA:CA	1:197:I:ASP:CA	4	0.82
(1,1357)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	1	0.82
(1,1191)	1:221:J:VAL:CG1	1:230:J:VAL:CG2	9	0.82
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	10	0.82
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	10	0.81
(1,2342)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:I:GLY:CA	2	0.81
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	10	0.81
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	8	0.81
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	8	0.81
(1,1845)	1:194:K:ALA:CA	1:197:K:ASP:CA	7	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1551)	1:174:L:ALA:CB	1:182:L:LYS:CE	9	0.81
(1,1357)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	4	0.81
(1,1357)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	10	0.81
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	5	0.81
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	9	0.8
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	2	0.8
(1,1736)	1:219:H:GLN:CB	1:160:H:PRO:CA	4	0.8
(1,1474)	1:167:I:ARG:CB	1:169:I:TYR:CD1	4	0.8
(1,1474)	1:167:I:ARG:CB	1:169:I:TYR:CD1	6	0.8
(1,551)	1:150:H:ILE:CA	1:164:H:TYR:CZ	5	0.8
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	8	0.79
(1,2342)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:I:GLY:CA	6	0.79
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	4	0.79
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	4	0.79
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	10	0.79
(1,1679)	1:191:J:VAL:CG1	1:198:J:CYS:CA	2	0.79
(1,1679)	1:191:J:VAL:CG1	1:198:J:CYS:CA	5	0.79
(1,1621)	1:190:K:LEU:CD1	1:166:K:ASP:CA	2	0.79
(1,1357)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	6	0.79
(1,823)	1:177:I:ALA:CB	1:185:I:MET:CA	8	0.79
(1,2341)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:I:GLY:CA	3	0.78
(1,2336)	3:302:H:A1CCY:F33	1:227:I:LYS:CD	10	0.78
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	6	0.78
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	5	0.78
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	6	0.78
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	6	0.78
(1,1621)	1:190:I:LEU:CD1	1:166:I:ASP:CA	5	0.78
(1,1551)	1:174:L:ALA:CB	1:182:L:LYS:CE	7	0.78
(1,1529)	1:192:G:GLN:CA	1:164:G:TYR:CZ	2	0.78
(1,823)	1:177:K:ALA:CB	1:185:K:MET:CA	9	0.78
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	6	0.77
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	3	0.77
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	10	0.77
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	7	0.77
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	4	0.77
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	6	0.77
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	9	0.77
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	4	0.77
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	4	0.77
(1,1840)	1:211:J:LEU:CD2	1:209:J:ALA:CA	2	0.77
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	7	0.77
(1,1736)	1:219:L:GLN:CB	1:160:L:PRO:CA	9	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1621)	1:190:G:LEU:CD1	1:166:G:ASP:CA	8	0.77
(1,1529)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	7	0.77
(1,1384)	1:189:G:LEU:CA	1:153:G:ILE:C	3	0.77
(1,1384)	1:189:K:LEU:CA	1:153:K:ILE:C	10	0.77
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	5	0.77
(1,878)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	5	0.77
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	6	0.77
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	1	0.76
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	7	0.76
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	6	0.76
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	6	0.76
(1,1877)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:C	8	0.76
(1,1845)	1:194:K:ALA:CA	1:197:K:ASP:CA	8	0.76
(1,1679)	1:191:I:VAL:CG1	1:198:I:CYS:CA	10	0.76
(1,1621)	1:190:J:LEU:CD1	1:166:J:ASP:CA	7	0.76
(1,1621)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	9	0.76
(1,1426)	1:150:J:ILE:CG2	1:190:J:LEU:CA	7	0.76
(1,1384)	1:189:I:LEU:CA	1:153:I:ILE:C	4	0.76
(1,1141)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CG	8	0.76
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	10	0.75
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	5	0.75
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	9	0.75
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	5	0.75
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	6	0.75
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	2	0.75
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	2	0.75
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	4	0.75
(1,1736)	1:219:H:GLN:CB	1:160:H:PRO:CA	8	0.75
(1,1679)	1:191:I:VAL:CG1	1:198:I:CYS:CA	7	0.75
(1,1491)	1:238:L:VAL:CG2	1:244:L:ILE:CB	2	0.75
(1,795)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CG	1	0.75
(1,628)	1:151:J:LEU:CG	1:153:J:ILE:CB	3	0.75
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	6	0.74
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	6	0.74
(1,2399)	3:302:H:A1CCY:F33	1:157:H:PRO:CG	8	0.74
(1,2341)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:I:GLY:CA	6	0.74
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	5	0.74
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	2	0.74
(1,865)	1:240:H:ASN:CB	1:237:H:GLN:CA	9	0.74
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	9	0.73
(1,2006)	1:175:J:GLU:CB	1:185:J:MET:CB	8	0.73
(1,1529)	1:192:G:GLN:CA	1:164:G:TYR:CZ	6	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1474)	1:167:K:ARG:CB	1:169:K:TYR:CD1	9	0.73
(1,600)	1:155:L:GLN:CB	1:196:L:PRO:CA	4	0.73
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	2	0.72
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	5	0.72
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	1	0.72
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	10	0.72
(1,1997)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	2	0.72
(1,1733)	1:201:H:ILE:CG1	1:214:H:MET:CA	6	0.72
(1,1646)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CB	2	0.72
(1,1518)	1:154:J:ARG:CG	1:151:J:LEU:CA	2	0.72
(1,1357)	1:235:L:MET:CB	1:230:L:VAL:CA	5	0.72
(1,1023)	1:165:K:VAL:CG2	1:163:K:ASP:CB	7	0.72
(1,1008)	1:235:J:MET:CB	1:233:J:GLU:CG	2	0.72
(1,600)	1:155:L:GLN:CB	1:196:L:PRO:CA	7	0.72
(1,600)	1:155:H:GLN:CB	1:196:H:PRO:CA	10	0.72
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	8	0.72
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	2	0.71
(1,2342)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:I:GLY:CA	4	0.71
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	7	0.71
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	5	0.71
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	5	0.71
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	6	0.71
(1,878)	1:187:I:GLU:CB	1:184:I:TRP:CZ3	3	0.71
(1,744)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	8	0.71
(1,2380)	3:302:H:A1CCY:F32	1:198:H:CYS:CA	5	0.7
(1,2368)	3:302:H:A1CCY:F31	1:159:H:GLU:CA	1	0.7
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	2	0.7
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	6	0.7
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	4	0.7
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	6	0.7
(1,2068)	1:214:J:MET:CB	1:198:J:CYS:CA	4	0.7
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	3	0.7
(1,1648)	1:190:I:LEU:CD1	1:155:I:GLN:CG	1	0.7
(1,1621)	1:190:I:LEU:CD1	1:166:I:ASP:CA	4	0.7
(1,1357)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	7	0.7
(1,1107)	1:150:J:ILE:CG2	1:168:J:PHE:C	1	0.7
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	7	0.7
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	4	0.69
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	4	0.69
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	5	0.69
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	9	0.69
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	8	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2006)	1:175:G:GLU:CB	1:185:G:MET:CB	10	0.69
(1,1997)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	7	0.69
(1,1978)	1:214:G:MET:CG	1:190:G:LEU:CB	8	0.69
(1,1679)	1:191:G:VAL:CG1	1:198:G:CYS:CA	6	0.69
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	1	0.69
(1,945)	1:172:H:LEU:CD1	1:153:H:ILE:CG1	5	0.69
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	2	0.69
(1,795)	1:190:K:LEU:CG	1:187:K:GLU:CG	2	0.69
(1,795)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CG	7	0.69
(1,539)	1:179:J:GLN:CB	1:177:J:ALA:CA	7	0.69
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	8	0.68
(1,1978)	1:214:L:MET:CG	1:190:L:LEU:CB	5	0.68
(1,1936)	1:160:L:PRO:CD	1:155:L:GLN:CA	5	0.68
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	8	0.68
(1,1679)	1:191:L:VAL:CG1	1:198:L:CYS:CA	3	0.68
(1,1648)	1:190:K:LEU:CD1	1:155:K:GLN:CG	7	0.68
(1,1336)	1:221:K:VAL:CG2	1:219:K:GLN:CG	8	0.68
(1,1191)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG2	10	0.68
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	5	0.68
(1,539)	1:179:I:GLN:CB	1:177:I:ALA:CA	8	0.68
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	4	0.67
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	6	0.67
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	7	0.67
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	3	0.67
(1,2161)	1:223:H:GLY:CA	1:157:G:PRO:CD	5	0.67
(1,1551)	1:174:K:ALA:CB	1:182:K:LYS:CE	10	0.67
(1,1336)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	5	0.67
(1,795)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CG	3	0.67
(1,600)	1:155:J:GLN:CB	1:196:J:PRO:CA	5	0.67
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	4	0.66
(1,2369)	3:302:H:A1CCY:F32	1:159:H:GLU:CA	1	0.66
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	8	0.66
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	8	0.66
(1,1997)	1:153:K:ILE:CG1	1:172:K:LEU:CA	8	0.66
(1,1336)	1:221:G:VAL:CG2	1:219:G:GLN:CG	3	0.66
(1,1141)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CG	5	0.66
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	7	0.66
(1,1008)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	7	0.66
(1,945)	1:172:H:LEU:CD1	1:153:H:ILE:CG1	4	0.66
(1,900)	1:230:K:VAL:CG1	1:233:K:GLU:CD	9	0.66
(1,879)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	6	0.66
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	5	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	8	0.65
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	10	0.65
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	1	0.65
(1,1529)	1:192:G:GLN:CA	1:164:G:TYR:CZ	9	0.65
(1,1426)	1:150:I:ILE:CG2	1:190:I:LEU:CA	10	0.65
(1,1141)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CG	2	0.65
(1,1008)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	3	0.65
(1,945)	1:172:I:LEU:CD1	1:153:I:ILE:CG1	2	0.65
(1,823)	1:177:L:ALA:CB	1:185:L:MET:CA	1	0.65
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	5	0.64
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	3	0.64
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	9	0.64
(1,2399)	3:302:H:A1CCY:F33	1:157:H:PRO:CG	9	0.64
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	8	0.64
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	2	0.64
(1,1518)	1:154:K:ARG:CG	1:151:K:LEU:CA	6	0.64
(1,1407)	1:244:G:ILE:CA	1:238:G:VAL:CA	6	0.64
(1,1336)	1:221:J:VAL:CG2	1:219:J:GLN:CG	9	0.64
(1,841)	1:174:J:ALA:CA	1:148:J:THR:CA	3	0.64
(1,823)	1:177:K:ALA:CB	1:185:K:MET:CA	6	0.64
(1,796)	1:168:K:PHE:CB	1:189:K:LEU:CB	3	0.64
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	6	0.63
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	10	0.63
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	6	0.63
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	9	0.63
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	9	0.63
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	7	0.63
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	5	0.63
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	3	0.63
(1,1736)	1:219:H:GLN:CB	1:160:H:PRO:CA	10	0.63
(1,1529)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	10	0.63
(1,1426)	1:150:I:ILE:CG2	1:190:I:LEU:CA	8	0.63
(1,628)	1:151:I:LEU:CG	1:153:I:ILE:CB	5	0.63
(1,487)	1:165:L:VAL:CG2	1:202:L:LEU:CG	8	0.63
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	6	0.62
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	9	0.62
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	4	0.62
(1,2068)	1:214:J:MET:CB	1:198:J:CYS:CA	6	0.62
(1,2006)	1:175:H:GLU:CB	1:185:H:MET:CB	1	0.62
(1,2006)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	9	0.62
(1,1052)	1:205:K:LEU:CB	1:208:K:GLY:CA	10	0.62
(1,551)	1:150:K:ILE:CA	1:164:K:TYR:CZ	9	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	2	0.62
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	4	0.61
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	5	0.61
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	5	0.61
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	3	0.61
(1,2235)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	5	0.61
(1,2068)	1:214:J:MET:CB	1:198:J:CYS:CA	1	0.61
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	7	0.61
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	2	0.61
(1,1897)	1:238:H:VAL:CG2	1:241:H:THR:CA	3	0.61
(1,1384)	1:189:H:LEU:CA	1:153:H:ILE:C	1	0.61
(1,744)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	6	0.61
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	2	0.6
(1,2404)	3:302:H:A1CCY:F32	1:222:H:GLY:CA	7	0.6
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	1	0.6
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	5	0.6
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	1	0.6
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	7	0.6
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	7	0.6
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	3	0.6
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	3	0.6
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	8	0.6
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	8	0.6
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	4	0.6
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	8	0.6
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	4	0.6
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	8	0.6
(1,1978)	1:214:L:MET:CG	1:190:L:LEU:CB	10	0.6
(1,1679)	1:191:L:VAL:CG1	1:198:L:CYS:CA	9	0.6
(1,1529)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	1	0.6
(1,1515)	1:150:J:ILE:CD1	1:167:J:ARG:CA	10	0.6
(1,1023)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	10	0.6
(1,600)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	1	0.6
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	3	0.59
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	3	0.59
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	3	0.59
(1,2381)	3:302:H:A1CCY:F33	1:198:H:CYS:CA	8	0.59
(1,2341)	3:302:H:A1CCY:F32	1:223:I:GLY:CA	4	0.59
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	4	0.59
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ1	8	0.59
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ2	8	0.59
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ3	8	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	5	0.59
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	5	0.59
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	5	0.59
(1,1840)	1:211:J:LEU:CD2	1:209:J:ALA:CA	7	0.59
(1,1529)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	5	0.59
(1,1491)	1:238:L:VAL:CG1	1:244:L:ILE:CB	6	0.59
(1,1474)	1:167:J:ARG:CB	1:169:J:TYR:CD1	1	0.59
(1,1473)	1:190:G:LEU:CD1	1:169:G:TYR:CB	3	0.59
(1,1249)	1:190:G:LEU:CA	1:165:G:VAL:CA	8	0.59
(1,945)	1:172:H:LEU:CD1	1:153:H:ILE:CG1	10	0.59
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	9	0.59
(1,628)	1:151:I:LEU:CG	1:153:I:ILE:CB	4	0.59
(1,600)	1:155:J:GLN:CB	1:196:J:PRO:CA	3	0.59
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	4	0.58
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	1	0.58
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	5	0.58
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	10	0.58
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	2	0.58
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	7	0.58
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	7	0.58
(1,1892)	1:152:L:ASP:CB	1:149:L:SER:CB	4	0.58
(1,1736)	1:219:H:GLN:CB	1:160:H:PRO:CA	5	0.58
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	7	0.58
(1,1679)	1:191:I:VAL:CG1	1:198:I:CYS:CA	8	0.58
(1,1648)	1:190:K:LEU:CD1	1:155:K:GLN:CG	5	0.58
(1,1621)	1:190:G:LEU:CD1	1:166:G:ASP:CA	10	0.58
(1,1551)	1:174:K:ALA:CB	1:182:K:LYS:CE	5	0.58
(1,1336)	1:221:L:VAL:CG2	1:219:L:GLN:CG	7	0.58
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	10	0.58
(1,795)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CG	9	0.58
(1,539)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	3	0.58
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	5	0.57
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	3	0.57
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	10	0.57
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	1	0.57
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	2	0.57
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	10	0.57
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	8	0.57
(1,1997)	1:153:L:ILE:CG1	1:172:L:LEU:CA	9	0.57
(1,1840)	1:211:J:LEU:CD2	1:209:J:ALA:CA	1	0.57
(1,1712)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	7	0.57
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	3	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,600)	1:155:L:GLN:CB	1:196:L:PRO:CA	2	0.57
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	3	0.56
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	7	0.56
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12A	6	0.56
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12B	6	0.56
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	7	0.56
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	10	0.56
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ1	9	0.56
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ2	9	0.56
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ3	9	0.56
(1,2153)	1:219:K:GLN:CG	1:155:J:GLN:CA	10	0.56
(1,1840)	1:211:J:LEU:CD2	1:209:J:ALA:CA	9	0.56
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	7	0.55
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	2	0.55
(1,2337)	3:302:H:A1CCY:F31	1:220:I:GLY:CA	4	0.55
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	7	0.55
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	5	0.55
(1,1997)	1:153:J:ILE:CG1	1:172:J:LEU:CA	4	0.55
(1,1997)	1:153:K:ILE:CG1	1:172:K:LEU:CA	5	0.55
(1,1997)	1:153:L:ILE:CG1	1:172:L:LEU:CA	6	0.55
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	3	0.55
(1,1474)	1:167:J:ARG:CB	1:169:J:TYR:CD1	10	0.55
(1,628)	1:151:K:LEU:CG	1:153:K:ILE:CB	10	0.55
(1,539)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	2	0.55
(1,539)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	5	0.55
(1,509)	1:149:G:SER:CA	1:152:G:ASP:CG	2	0.55
(1,484)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	4	0.55
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12A	4	0.54
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12B	4	0.54
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	1	0.54
(1,2359)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CB	6	0.54
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	7	0.54
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	3	0.54
(1,1910)	1:150:J:ILE:CG2	1:153:J:ILE:CG1	1	0.54
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	1	0.54
(1,1840)	1:211:L:LEU:CD2	1:209:L:ALA:CA	4	0.54
(1,1784)	1:151:L:LEU:CG	1:189:L:LEU:CB	4	0.54
(1,1776)	1:205:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CA	5	0.54
(1,1473)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	5	0.54
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	4	0.54
(1,1111)	1:207:H:PRO:CG	1:202:H:LEU:CA	8	0.54
(1,1052)	1:205:K:LEU:CB	1:208:K:GLY:CA	6	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,920)	1:153:H:ILE:CD1	1:193:H:ASN:CG	7	0.54
(1,879)	1:230:L:VAL:CG2	1:221:L:VAL:CA	3	0.54
(1,795)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CG	10	0.54
(1,744)	1:201:H:ILE:CG2	1:197:H:ASP:CB	9	0.54
(1,716)	1:194:K:ALA:CB	1:154:K:ARG:CG	2	0.54
(1,628)	1:151:I:LEU:CG	1:153:I:ILE:CB	8	0.54
(1,539)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	10	0.54
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	3	0.54
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	2	0.53
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	4	0.53
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	3	0.53
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	10	0.53
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	7	0.53
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	7	0.53
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	9	0.53
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	10	0.53
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	3	0.53
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	9	0.53
(1,1997)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	3	0.53
(1,1978)	1:214:H:MET:CG	1:190:H:LEU:CB	4	0.53
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	10	0.53
(1,1107)	1:150:I:ILE:CG2	1:168:I:PHE:C	8	0.53
(1,1039)	1:201:H:ILE:CD1	1:202:H:LEU:C	8	0.53
(1,1024)	1:189:L:LEU:CG	1:184:L:TRP:CD2	7	0.53
(1,1023)	1:165:L:VAL:CG2	1:163:L:ASP:CB	4	0.53
(1,878)	1:187:I:GLU:CB	1:184:I:TRP:CZ3	8	0.53
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	7	0.52
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	7	0.52
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	4	0.52
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	9	0.52
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ1	8	0.52
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ2	8	0.52
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ3	8	0.52
(1,2235)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	2	0.52
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	5	0.52
(1,1910)	1:150:J:ILE:CG2	1:153:J:ILE:CG1	10	0.52
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	8	0.52
(1,1841)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	7	0.52
(1,1529)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	4	0.52
(1,1249)	1:190:H:LEU:CA	1:165:H:VAL:CA	9	0.52
(1,1008)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	4	0.52
(1,899)	1:201:G:ILE:CG1	1:205:G:LEU:CA	2	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,744)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	4	0.52
(1,744)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	10	0.52
(1,600)	1:155:H:GLN:CB	1:196:H:PRO:CA	9	0.52
(1,487)	1:165:L:VAL:CG2	1:202:L:LEU:CG	10	0.52
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	3	0.51
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	3	0.51
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	3	0.51
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	4	0.51
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	7	0.51
(1,1978)	1:214:H:MET:CG	1:190:H:LEU:CB	2	0.51
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	9	0.51
(1,1873)	1:214:H:MET:CB	1:205:H:LEU:CA	4	0.51
(1,1621)	1:190:K:LEU:CD1	1:166:K:ASP:CA	3	0.51
(1,1384)	1:189:L:LEU:CA	1:153:L:ILE:C	8	0.51
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	10	0.51
(1,1107)	1:150:J:ILE:CG2	1:168:J:PHE:C	2	0.51
(1,1039)	1:201:L:ILE:CD1	1:202:L:LEU:C	1	0.51
(1,1039)	1:201:L:ILE:CD1	1:202:L:LEU:C	2	0.51
(1,1039)	1:201:J:ILE:CD1	1:202:J:LEU:C	6	0.51
(1,1039)	1:201:G:ILE:CD1	1:202:G:LEU:C	7	0.51
(1,539)	1:179:J:GLN:CB	1:177:J:ALA:CA	1	0.51
(1,484)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	8	0.51
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	3	0.5
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	1	0.5
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	1	0.5
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	1	0.5
(1,2409)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CA	10	0.5
(1,2352)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CB	5	0.5
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	8	0.5
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	9	0.5
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	3	0.5
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	3	0.5
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	2	0.5
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	7	0.5
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	3	0.5
(1,1978)	1:214:H:MET:CG	1:190:H:LEU:CB	9	0.5
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	7	0.5
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	10	0.5
(1,1191)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG2	2	0.5
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	8	0.5
(1,879)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	4	0.5
(1,879)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	9	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	8	0.5
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	2	0.49
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	7	0.49
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	2	0.49
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	2	0.49
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	8	0.49
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	5	0.49
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	1	0.49
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	7	0.49
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	7	0.49
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ1	7	0.49
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ2	7	0.49
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ3	7	0.49
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	7	0.49
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	7	0.49
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	8	0.49
(1,1978)	1:214:H:MET:CG	1:190:H:LEU:CB	3	0.49
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	1	0.49
(1,1873)	1:214:L:MET:CB	1:205:L:LEU:CA	10	0.49
(1,1840)	1:211:K:LEU:CD2	1:209:K:ALA:CA	5	0.49
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	1	0.49
(1,1431)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CA	7	0.49
(1,1337)	1:197:I:ASP:CB	1:222:I:GLY:C	5	0.49
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	9	0.49
(1,1107)	1:150:I:ILE:CG2	1:168:I:PHE:C	4	0.49
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	2	0.49
(1,744)	1:201:G:ILE:CG2	1:197:G:ASP:CB	1	0.49
(1,142)	1:191:H:VAL:N	1:199:H:LYS:CE	1	0.49
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12A	3	0.48
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12B	3	0.48
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	5	0.48
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	5	0.48
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	6	0.48
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	6	0.48
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD2	3	0.48
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD3	3	0.48
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	7	0.48
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	9	0.48
(1,1431)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CA	3	0.48
(1,1384)	1:189:H:LEU:CA	1:153:H:ILE:C	9	0.48
(1,1008)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	6	0.48
(1,1008)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	10	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,879)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	10	0.48
(1,878)	1:187:L:GLU:CB	1:184:L:TRP:CZ3	10	0.48
(1,823)	1:177:L:ALA:CB	1:185:L:MET:CA	7	0.48
(1,796)	1:168:J:PHE:CB	1:189:J:LEU:CB	8	0.48
(1,539)	1:179:L:GLN:CB	1:177:L:ALA:CA	9	0.48
(1,505)	1:150:J:ILE:CG2	1:182:J:LYS:C	3	0.48
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	8	0.47
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	8	0.47
(1,2292)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:F33	7	0.47
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	2	0.47
(1,1976)	1:148:K:THR:CA	1:174:K:ALA:C	7	0.47
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	2	0.47
(1,1780)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	8	0.47
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	1	0.47
(1,1733)	1:201:K:ILE:CG1	1:214:K:MET:CA	5	0.47
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	9	0.47
(1,1474)	1:167:J:ARG:CB	1:169:J:TYR:CD1	8	0.47
(1,1473)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	7	0.47
(1,1384)	1:189:I:LEU:CA	1:153:I:ILE:C	5	0.47
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	1	0.47
(1,628)	1:151:J:LEU:CG	1:153:J:ILE:CB	1	0.47
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	5	0.46
(1,2399)	3:302:H:A1CCY:F33	1:157:H:PRO:CG	10	0.46
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ1	5	0.46
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ2	5	0.46
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ3	5	0.46
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD2	4	0.46
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD3	4	0.46
(1,2166)	1:162:H:ARG:CG	1:152:G:ASP:CB	8	0.46
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	6	0.46
(1,1306)	1:153:J:ILE:CG2	1:169:J:TYR:C	2	0.46
(1,1249)	1:190:L:LEU:CA	1:165:L:VAL:CA	4	0.46
(1,1039)	1:201:K:ILE:CD1	1:202:K:LEU:C	4	0.46
(1,920)	1:153:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	4	0.46
(1,879)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	1	0.46
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE1	10	0.46
(1,600)	1:155:L:GLN:CB	1:196:L:PRO:CA	8	0.46
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	4	0.46
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	2	0.46
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	5	0.45
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	7	0.45
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	2	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2163)	1:162:K:ARG:CG	1:152:J:ASP:CB	10	0.45
(1,1978)	1:214:I:MET:CG	1:190:I:LEU:CB	7	0.45
(1,1336)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	10	0.45
(1,1107)	1:150:J:ILE:CG2	1:168:J:PHE:C	3	0.45
(1,1039)	1:201:I:ILE:CD1	1:202:I:LEU:C	3	0.45
(1,1039)	1:201:H:ILE:CD1	1:202:H:LEU:C	10	0.45
(1,1008)	1:235:I:MET:CB	1:233:I:GLU:CG	1	0.45
(1,694)	1:196:H:PRO:CD	1:200:H:THR:CB	7	0.45
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	3	0.45
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	9	0.45
(1,142)	1:191:L:VAL:N	1:199:L:LYS:CE	10	0.45
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	1	0.44
(1,2306)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F32	3	0.44
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ1	8	0.44
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ2	8	0.44
(1,2240)	2:301:H:IHP:P4	1:227:I:LYS:HZ3	8	0.44
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD2	3	0.44
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD3	3	0.44
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	4	0.44
(1,1712)	1:172:G:LEU:CD1	1:183:G:ASN:CB	3	0.44
(1,1648)	1:190:I:LEU:CD1	1:155:I:GLN:CG	4	0.44
(1,1621)	1:190:K:LEU:CD1	1:166:K:ASP:CA	6	0.44
(1,1529)	1:192:K:GLN:CA	1:164:K:TYR:CZ	3	0.44
(1,1357)	1:235:L:MET:CB	1:230:L:VAL:CA	9	0.44
(1,1249)	1:190:K:LEU:CA	1:165:K:VAL:CA	2	0.44
(1,1249)	1:190:H:LEU:CA	1:165:H:VAL:CA	5	0.44
(1,1111)	1:207:H:PRO:CG	1:202:H:LEU:CA	5	0.44
(1,1053)	1:211:I:LEU:CD2	1:190:I:LEU:C	7	0.44
(1,1039)	1:201:L:ILE:CD1	1:202:L:LEU:C	5	0.44
(1,900)	1:230:K:VAL:CG1	1:233:K:GLU:CD	10	0.44
(1,850)	1:150:J:ILE:CG1	1:171:J:THR:CA	10	0.44
(1,795)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CG	8	0.44
(1,551)	1:150:L:ILE:CA	1:164:L:TYR:CZ	4	0.44
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	7	0.44
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9A	1:232:H:ALA:CA	7	0.43
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9B	1:232:H:ALA:CA	7	0.43
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12A	1:232:I:ALA:CA	6	0.43
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12B	1:232:I:ALA:CA	6	0.43
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	5	0.43
(1,2142)	1:156:I:GLY:CA	1:160:J:PRO:CD	2	0.43
(1,1473)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	6	0.43
(1,1384)	1:189:G:LEU:CA	1:153:G:ILE:C	2	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1342)	1:153:L:ILE:CD1	1:151:L:LEU:C	3	0.43
(1,1336)	1:221:H:VAL:CG2	1:219:H:GLN:CG	1	0.43
(1,1206)	1:172:H:LEU:CD1	1:189:H:LEU:CG	2	0.43
(1,1141)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CG	3	0.43
(1,1111)	1:207:L:PRO:CG	1:202:L:LEU:CA	7	0.43
(1,1107)	1:150:J:ILE:CG2	1:168:J:PHE:C	5	0.43
(1,1023)	1:165:K:VAL:CG2	1:163:K:ASP:CB	3	0.43
(1,945)	1:172:H:LEU:CD1	1:153:H:ILE:CG1	1	0.43
(1,795)	1:190:K:LEU:CG	1:187:K:GLU:CG	5	0.43
(1,548)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	1	0.43
(1,539)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	4	0.43
(1,487)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	3	0.43
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	8	0.42
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	8	0.42
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	10	0.42
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	10	0.42
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	4	0.42
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12A	1:232:I:ALA:CA	1	0.42
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12B	1:232:I:ALA:CA	1	0.42
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12A	1:232:I:ALA:CA	4	0.42
(1,2354)	3:302:H:A1CCY:H12B	1:232:I:ALA:CA	4	0.42
(1,2352)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CB	3	0.42
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	7	0.42
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	4	0.42
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	4	0.42
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	4	0.42
(1,2035)	1:198:K:CYS:CB	1:214:K:MET:CA	2	0.42
(1,2035)	1:198:I:CYS:CB	1:214:I:MET:CA	8	0.42
(1,1826)	1:159:L:GLU:CG	1:165:L:VAL:CA	4	0.42
(1,1712)	1:172:G:LEU:CD1	1:183:G:ASN:CB	8	0.42
(1,1551)	1:174:K:ALA:CB	1:182:K:LYS:CE	3	0.42
(1,1431)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CA	5	0.42
(1,1342)	1:153:G:ILE:CD1	1:151:G:LEU:C	8	0.42
(1,1321)	1:153:I:ILE:CG2	1:164:I:TYR:CA	8	0.42
(1,1039)	1:201:H:ILE:CD1	1:202:H:LEU:C	9	0.42
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	7	0.42
(1,875)	1:162:J:ARG:CA	1:218:J:CYS:CA	2	0.42
(1,614)	1:161:L:PHE:CD1	1:165:L:VAL:C	7	0.42
(1,539)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	6	0.42
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	10	0.41
(1,2408)	3:302:H:A1CCY:F33	1:222:I:GLY:CA	6	0.41
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	3	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ1	10	0.41
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ2	10	0.41
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ3	10	0.41
(1,2035)	1:198:J:CYS:CB	1:214:J:MET:CA	3	0.41
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	4	0.41
(1,1592)	1:153:H:ILE:CB	1:193:H:ASN:CA	10	0.41
(1,1473)	1:190:L:LEU:CD1	1:169:L:TYR:CB	2	0.41
(1,1359)	1:221:G:VAL:CG1	1:223:H:GLY:CA	8	0.41
(1,823)	1:177:L:ALA:CB	1:185:L:MET:CA	10	0.41
(1,796)	1:168:J:PHE:CB	1:189:J:LEU:CB	10	0.41
(1,600)	1:155:J:GLN:CB	1:196:J:PRO:CA	6	0.41
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	1	0.4
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9A	9	0.4
(2,30)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H9B	9	0.4
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	6	0.4
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	4	0.4
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	4	0.4
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	7	0.4
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	7	0.4
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	4	0.4
(1,1873)	1:214:J:MET:CB	1:205:J:LEU:CA	1	0.4
(1,1840)	1:211:I:LEU:CD2	1:209:I:ALA:CA	6	0.4
(1,1840)	1:211:J:LEU:CD2	1:209:J:ALA:CA	8	0.4
(1,1782)	1:185:G:MET:CG	1:182:G:LYS:CE	8	0.4
(1,1648)	1:190:I:LEU:CD1	1:155:I:GLN:CG	9	0.4
(1,1473)	1:190:J:LEU:CD1	1:169:J:TYR:CB	8	0.4
(1,1473)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	10	0.4
(1,1426)	1:150:J:ILE:CG2	1:190:J:LEU:CA	3	0.4
(1,1348)	1:197:G:ASP:CB	1:218:G:CYS:CA	3	0.4
(1,1191)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG2	7	0.4
(1,1024)	1:189:J:LEU:CG	1:184:J:TRP:CD2	1	0.4
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	8	0.4
(1,878)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	1	0.4
(1,823)	1:177:K:ALA:CB	1:185:K:MET:CA	4	0.4
(1,719)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	6	0.4
(1,694)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	2	0.4
(1,694)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	3	0.4
(1,694)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	5	0.4
(1,694)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	8	0.4
(1,2375)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:H:LYS:CA	2	0.39
(1,2365)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:H:GLY:CA	8	0.39
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	2	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2131)	1:195:J:ASN:CA	1:219:K:GLN:CA	3	0.39
(1,2006)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	2	0.39
(1,1936)	1:160:J:PRO:CD	1:155:J:GLN:CA	10	0.39
(1,1840)	1:211:I:LEU:CD2	1:209:I:ALA:CA	10	0.39
(1,1782)	1:185:J:MET:CG	1:182:J:LYS:CE	4	0.39
(1,1592)	1:153:K:ILE:CB	1:193:K:ASN:CA	7	0.39
(1,1518)	1:154:G:ARG:CG	1:151:G:LEU:CA	4	0.39
(1,1415)	1:152:L:ASP:CA	1:149:L:SER:CA	2	0.39
(1,1023)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	1	0.39
(1,718)	1:161:J:PHE:CD2	1:165:J:VAL:C	7	0.39
(1,580)	1:211:K:LEU:CD1	1:212:K:GLU:CD	6	0.39
(1,548)	1:198:I:CYS:CB	1:199:I:LYS:CE	6	0.39
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	6	0.39
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	3	0.38
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	3	0.38
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9A	6	0.38
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9B	6	0.38
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	9	0.38
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	2	0.38
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	6	0.38
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	4	0.38
(1,2068)	1:214:I:MET:CB	1:198:I:CYS:CA	8	0.38
(1,2066)	1:204:G:ALA:CB	1:206:G:GLY:C	4	0.38
(1,2064)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	5	0.38
(1,2064)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	7	0.38
(1,2035)	1:198:L:CYS:CB	1:214:L:MET:CA	6	0.38
(1,2006)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	5	0.38
(1,1922)	1:193:K:ASN:CB	1:188:K:THR:C	7	0.38
(1,1873)	1:214:J:MET:CB	1:205:J:LEU:CA	5	0.38
(1,1782)	1:185:G:MET:CG	1:182:G:LYS:CE	2	0.38
(1,1733)	1:201:J:ILE:CG1	1:214:J:MET:CA	4	0.38
(1,1348)	1:197:I:ASP:CB	1:218:I:CYS:CA	7	0.38
(1,1348)	1:197:J:ASP:CB	1:218:J:CYS:CA	8	0.38
(1,1141)	1:151:L:LEU:CG	1:189:L:LEU:CG	10	0.38
(1,1053)	1:211:I:LEU:CD2	1:190:I:LEU:C	5	0.38
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	3	0.38
(1,865)	1:240:H:ASN:CB	1:237:H:GLN:CA	3	0.38
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	1	0.38
(1,796)	1:168:J:PHE:CB	1:189:J:LEU:CB	1	0.38
(1,719)	1:210:I:THR:CG2	1:211:I:LEU:CG	1	0.38
(1,484)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	10	0.38
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2412)	3:302:H:A1CCY:F31	1:221:H:VAL:CB	7	0.37
(1,2385)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:H:HIS:CD2	2	0.37
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	6	0.37
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	8	0.37
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	2	0.37
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	2	0.37
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	3	0.37
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD2	6	0.37
(1,2225)	2:301:H:IHP:P5	1:227:L:LYS:HD3	6	0.37
(1,2006)	1:175:L:GLU:CB	1:185:L:MET:CB	3	0.37
(1,1873)	1:214:G:MET:CB	1:205:G:LEU:CA	6	0.37
(1,1736)	1:219:L:GLN:CB	1:160:L:PRO:CA	1	0.37
(1,1473)	1:190:G:LEU:CD1	1:169:G:TYR:CB	1	0.37
(1,1426)	1:150:J:ILE:CG2	1:190:J:LEU:CA	1	0.37
(1,1359)	1:221:K:VAL:CG1	1:223:K:GLY:CA	10	0.37
(1,1310)	1:150:H:ILE:CD1	1:193:H:ASN:CG	7	0.37
(1,1053)	1:211:L:LEU:CD2	1:190:L:LEU:C	8	0.37
(1,920)	1:153:I:ILE:CD1	1:193:I:ASN:CG	8	0.37
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	3	0.37
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	6	0.37
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	10	0.37
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	2	0.36
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	2	0.36
(1,2335)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CD	1	0.36
(1,2334)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:I:LYS:CD	3	0.36
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	2	0.36
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ1	2	0.36
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ2	2	0.36
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ3	2	0.36
(1,2235)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	3	0.36
(1,2159)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	9	0.36
(1,2064)	1:160:I:PRO:CG	1:161:I:PHE:CG	3	0.36
(1,1910)	1:150:I:ILE:CG2	1:153:I:ILE:CG1	7	0.36
(1,1877)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:C	10	0.36
(1,1782)	1:185:G:MET:CG	1:182:G:LYS:CE	3	0.36
(1,1491)	1:238:H:VAL:CG2	1:244:H:ILE:CB	9	0.36
(1,1431)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CA	2	0.36
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	9	0.36
(1,580)	1:211:I:LEU:CD1	1:212:I:GLU:CD	5	0.36
(1,548)	1:198:I:CYS:CB	1:199:I:LYS:CE	9	0.36
(1,505)	1:150:J:ILE:CG2	1:182:J:LYS:C	5	0.36
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	4	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	4	0.35
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	6	0.35
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	6	0.35
(1,2410)	3:302:H:A1CCY:F32	1:221:H:VAL:CA	8	0.35
(1,2404)	3:302:H:A1CCY:F32	1:222:H:GLY:CA	8	0.35
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	9	0.35
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	6	0.35
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	10	0.35
(1,2292)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:F33	3	0.35
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD2	7	0.35
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD3	7	0.35
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	8	0.35
(1,2066)	1:204:L:ALA:CB	1:206:L:GLY:C	2	0.35
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	2	0.35
(1,1873)	1:214:J:MET:CB	1:205:J:LEU:CA	8	0.35
(1,1336)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	2	0.35
(1,1053)	1:211:L:LEU:CD2	1:190:L:LEU:C	2	0.35
(1,1008)	1:235:I:MET:CB	1:233:I:GLU:CG	9	0.35
(1,878)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	2	0.35
(1,823)	1:177:L:ALA:CB	1:185:L:MET:CA	5	0.35
(1,694)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	9	0.35
(1,694)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	10	0.35
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE1	1	0.35
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12A	7	0.34
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12B	7	0.34
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	1	0.34
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	1	0.34
(1,2202)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	3	0.34
(1,2106)	1:150:L:ILE:CG1	1:175:L:GLU:CB	4	0.34
(1,2064)	1:160:I:PRO:CG	1:161:I:PHE:CG	10	0.34
(1,1976)	1:148:I:THR:CA	1:174:I:ALA:C	3	0.34
(1,1907)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:CG2	2	0.34
(1,1873)	1:214:J:MET:CB	1:205:J:LEU:CA	2	0.34
(1,1873)	1:214:L:MET:CB	1:205:L:LEU:CA	7	0.34
(1,1873)	1:214:G:MET:CB	1:205:G:LEU:CA	9	0.34
(1,1840)	1:211:K:LEU:CD2	1:209:K:ALA:CA	3	0.34
(1,1648)	1:190:J:LEU:CD1	1:155:J:GLN:CG	2	0.34
(1,1592)	1:153:K:ILE:CB	1:193:K:ASN:CA	5	0.34
(1,1342)	1:153:J:ILE:CD1	1:151:J:LEU:C	5	0.34
(1,1053)	1:211:L:LEU:CD2	1:190:L:LEU:C	3	0.34
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	1	0.34
(1,920)	1:153:G:ILE:CD1	1:193:G:ASN:CG	2	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,900)	1:230:K:VAL:CG1	1:233:K:GLU:CD	3	0.34
(1,142)	1:191:I:VAL:N	1:199:I:LYS:CE	5	0.34
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9A	4	0.33
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9B	4	0.33
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	1	0.33
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	10	0.33
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	10	0.33
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	4	0.33
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	7	0.33
(1,2035)	1:198:J:CYS:CB	1:214:J:MET:CA	9	0.33
(1,2035)	1:198:I:CYS:CB	1:214:I:MET:CA	10	0.33
(1,1932)	1:153:K:ILE:CG1	1:193:K:ASN:CB	2	0.33
(1,1922)	1:193:I:ASN:CB	1:188:I:THR:C	5	0.33
(1,1910)	1:150:I:ILE:CG2	1:153:I:ILE:CG1	3	0.33
(1,1873)	1:214:L:MET:CB	1:205:L:LEU:CA	3	0.33
(1,1780)	1:217:H:ALA:CB	1:221:H:VAL:CG2	2	0.33
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	8	0.33
(1,1473)	1:190:L:LEU:CD1	1:169:L:TYR:CB	9	0.33
(1,1191)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG2	5	0.33
(1,1111)	1:207:H:PRO:CG	1:202:H:LEU:CA	3	0.33
(1,920)	1:153:H:ILE:CD1	1:193:H:ASN:CG	3	0.33
(1,796)	1:168:H:PHE:CB	1:189:H:LEU:CB	7	0.33
(1,751)	1:202:K:LEU:CD1	1:199:K:LYS:CD	7	0.33
(1,475)	1:215:H:MET:CG	1:219:H:GLN:C	8	0.33
(1,467)	1:153:K:ILE:CG2	1:167:K:ARG:CG	7	0.33
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	8	0.32
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9A	2	0.32
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9B	2	0.32
(1,2206)	1:219:I:GLN:CG	1:195:H:ASN:CA	9	0.32
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	1	0.32
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	8	0.32
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	8	0.32
(1,2124)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	10	0.32
(1,2066)	1:204:K:ALA:CB	1:206:K:GLY:C	7	0.32
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	2	0.32
(1,1712)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	5	0.32
(1,1648)	1:190:K:LEU:CD1	1:155:K:GLN:CG	8	0.32
(1,1337)	1:197:J:ASP:CB	1:222:J:GLY:C	7	0.32
(1,1111)	1:207:K:PRO:CG	1:202:K:LEU:CA	9	0.32
(1,899)	1:201:J:ILE:CG1	1:205:J:LEU:CA	1	0.32
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	5	0.32
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	9	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,865)	1:240:K:ASN:CB	1:237:K:GLN:CA	4	0.32
(1,719)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	4	0.32
(1,505)	1:150:I:ILE:CG2	1:182:I:LYS:C	8	0.32
(1,142)	1:191:L:VAL:N	1:199:L:LYS:CE	4	0.32
(2,34)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:H11	10	0.31
(1,2365)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:H:GLY:CA	7	0.31
(1,2344)	3:302:H:A1CCY:F32	1:227:I:LYS:CA	1	0.31
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ1	10	0.31
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ2	10	0.31
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ3	10	0.31
(1,2206)	1:219:I:GLN:CG	1:195:H:ASN:CA	6	0.31
(1,2129)	1:195:H:ASN:CA	1:219:I:GLN:CA	6	0.31
(1,2066)	1:204:K:ALA:CB	1:206:K:GLY:C	5	0.31
(1,2064)	1:160:I:PRO:CG	1:161:I:PHE:CG	1	0.31
(1,2035)	1:198:J:CYS:CB	1:214:J:MET:CA	1	0.31
(1,1976)	1:148:I:THR:CA	1:174:I:ALA:C	8	0.31
(1,1922)	1:193:I:ASN:CB	1:188:I:THR:C	4	0.31
(1,1877)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	5	0.31
(1,1712)	1:172:G:LEU:CD1	1:183:G:ASN:CB	4	0.31
(1,1415)	1:152:L:ASP:CA	1:149:L:SER:CA	6	0.31
(1,1359)	1:221:L:VAL:CG1	1:223:L:GLY:CA	1	0.31
(1,1336)	1:221:J:VAL:CG2	1:219:J:GLN:CG	4	0.31
(1,1191)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG2	8	0.31
(1,1111)	1:207:H:PRO:CG	1:202:H:LEU:CA	2	0.31
(1,694)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	4	0.31
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	7	0.3
(1,2292)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:F33	4	0.3
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD2	3	0.3
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD3	3	0.3
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD2	5	0.3
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD3	5	0.3
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	2	0.3
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	5	0.3
(1,2129)	1:195:H:ASN:CA	1:219:I:GLN:CA	8	0.3
(1,2066)	1:204:J:ALA:CB	1:206:J:GLY:C	8	0.3
(1,2036)	1:190:I:LEU:CD1	1:194:I:ALA:C	8	0.3
(1,2035)	1:198:J:CYS:CB	1:214:J:MET:CA	4	0.3
(1,1473)	1:190:L:LEU:CD1	1:169:L:TYR:CB	4	0.3
(1,1404)	1:158:H:LYS:CD	1:159:H:GLU:CD	8	0.3
(1,879)	1:230:H:VAL:CG2	1:221:H:VAL:CA	8	0.3
(1,798)	1:150:I:ILE:CD1	1:151:I:LEU:CD1	7	0.3
(1,796)	1:168:J:PHE:CB	1:189:J:LEU:CB	5	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,505)	1:150:I:ILE:CG2	1:182:I:LYS:C	4	0.3
(1,487)	1:165:L:VAL:CG2	1:202:L:LEU:CG	9	0.3
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12A	2	0.29
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12B	2	0.29
(1,2347)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:I:HIS:CA	10	0.29
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	10	0.29
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD2	5	0.29
(1,2265)	2:301:H:IHP:P2	1:157:L:PRO:HD3	5	0.29
(1,2066)	1:204:K:ALA:CB	1:206:K:GLY:C	3	0.29
(1,2064)	1:160:I:PRO:CG	1:161:I:PHE:CG	9	0.29
(1,1978)	1:214:L:MET:CG	1:190:L:LEU:CB	1	0.29
(1,1922)	1:193:I:ASN:CB	1:188:I:THR:C	10	0.29
(1,1841)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	8	0.29
(1,1782)	1:185:G:MET:CG	1:182:G:LYS:CE	10	0.29
(1,1299)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CB	7	0.29
(1,1249)	1:190:J:LEU:CA	1:165:J:VAL:CA	7	0.29
(1,1141)	1:151:K:LEU:CG	1:189:K:LEU:CG	9	0.29
(1,879)	1:230:H:VAL:CG2	1:221:H:VAL:CA	5	0.29
(1,570)	1:156:K:GLY:CA	1:196:K:PRO:CD	3	0.29
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	3	0.28
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	6	0.28
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ1	5	0.28
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ2	5	0.28
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ3	5	0.28
(1,2133)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	9	0.28
(1,2035)	1:198:I:CYS:CB	1:214:I:MET:CA	5	0.28
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	5	0.28
(1,1804)	1:150:J:ILE:CG2	1:172:J:LEU:CG	10	0.28
(1,1551)	1:174:K:ALA:CB	1:182:K:LYS:CE	4	0.28
(1,1359)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	9	0.28
(1,1111)	1:207:H:PRO:CG	1:202:H:LEU:CA	1	0.28
(1,945)	1:172:I:LEU:CD1	1:153:I:ILE:CG1	3	0.28
(1,920)	1:153:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	9	0.28
(1,729)	1:150:J:ILE:CD1	1:190:J:LEU:CD1	1	0.28
(1,719)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	9	0.28
(1,694)	1:196:H:PRO:CD	1:200:H:THR:CB	1	0.28
(1,570)	1:156:H:GLY:CA	1:196:H:PRO:CD	9	0.28
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	9	0.27
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9A	1:232:H:ALA:CA	5	0.27
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9B	1:232:H:ALA:CA	5	0.27
(1,2323)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F32	3	0.27
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	6	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2064)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	2	0.27
(1,2064)	1:160:I:PRO:CG	1:161:I:PHE:CG	6	0.27
(1,2036)	1:190:J:LEU:CD1	1:194:J:ALA:C	1	0.27
(1,1978)	1:214:L:MET:CG	1:190:L:LEU:CB	6	0.27
(1,1945)	1:165:J:VAL:CB	1:211:J:LEU:CB	9	0.27
(1,1932)	1:153:K:ILE:CG1	1:193:K:ASN:CB	3	0.27
(1,1796)	1:162:L:ARG:CG	1:161:L:PHE:CD1	9	0.27
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	3	0.27
(1,1725)	1:214:L:MET:CG	1:207:L:PRO:CA	2	0.27
(1,1648)	1:190:I:LEU:CD1	1:155:I:GLN:CG	10	0.27
(1,1592)	1:153:H:ILE:CB	1:193:H:ASN:CA	3	0.27
(1,1551)	1:174:L:ALA:CB	1:182:L:LYS:CE	1	0.27
(1,1342)	1:153:J:ILE:CD1	1:151:J:LEU:C	7	0.27
(1,1107)	1:150:H:ILE:CG2	1:168:H:PHE:C	6	0.27
(1,1024)	1:189:J:LEU:CG	1:184:J:TRP:CD2	8	0.27
(1,1023)	1:165:L:VAL:CG2	1:163:L:ASP:CB	6	0.27
(1,899)	1:201:K:ILE:CG1	1:205:K:LEU:CA	4	0.27
(1,751)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	10	0.27
(1,475)	1:215:H:MET:CG	1:219:H:GLN:C	7	0.27
(1,2393)	3:302:H:A1CCY:H12A	1:232:H:ALA:CB	8	0.26
(1,2393)	3:302:H:A1CCY:H12B	1:232:H:ALA:CB	8	0.26
(1,2365)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:H:GLY:CA	5	0.26
(1,2292)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:F33	6	0.26
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	1	0.26
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	1	0.26
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	2	0.26
(1,2106)	1:150:L:ILE:CG1	1:175:L:GLU:CB	10	0.26
(1,2066)	1:204:J:ALA:CB	1:206:J:GLY:C	1	0.26
(1,2066)	1:204:G:ALA:CB	1:206:G:GLY:C	9	0.26
(1,2064)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	8	0.26
(1,2054)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	9	0.26
(1,2036)	1:190:J:LEU:CD1	1:194:J:ALA:C	7	0.26
(1,1997)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	10	0.26
(1,1943)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CB	1	0.26
(1,1922)	1:193:I:ASN:CB	1:188:I:THR:C	2	0.26
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	3	0.26
(1,1841)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	10	0.26
(1,1742)	1:180:G:GLU:CG	1:184:G:TRP:CA	5	0.26
(1,1736)	1:219:K:GLN:CB	1:160:K:PRO:CA	3	0.26
(1,1359)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	7	0.26
(1,1357)	1:235:L:MET:CB	1:230:L:VAL:CA	2	0.26
(1,1348)	1:197:I:ASP:CB	1:218:I:CYS:CA	10	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1166)	1:191:H:VAL:CG1	1:193:H:ASN:CA	4	0.26
(1,1053)	1:211:L:LEU:CD2	1:190:L:LEU:C	10	0.26
(1,878)	1:187:I:GLU:CB	1:184:I:TRP:CZ3	6	0.26
(1,848)	1:189:J:LEU:CG	1:151:J:LEU:CB	8	0.26
(1,848)	1:189:I:LEU:CG	1:151:I:LEU:CB	10	0.26
(1,547)	1:190:H:LEU:CG	1:164:H:TYR:CB	10	0.26
(1,509)	1:149:G:SER:CA	1:152:G:ASP:CG	6	0.26
(1,2374)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:H:LYS:CA	6	0.25
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD2	2	0.25
(1,2264)	2:301:H:IHP:P2	1:157:G:PRO:HD3	2	0.25
(1,2165)	1:162:I:ARG:CG	1:152:H:ASP:CB	3	0.25
(1,2164)	1:162:J:ARG:CG	1:152:I:ASP:CB	2	0.25
(1,2143)	1:156:J:GLY:CA	1:160:K:PRO:CD	3	0.25
(1,1892)	1:152:I:ASP:CB	1:149:I:SER:CB	7	0.25
(1,1877)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:C	4	0.25
(1,1877)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	7	0.25
(1,1877)	1:153:L:ILE:CG2	1:165:L:VAL:C	9	0.25
(1,1782)	1:185:I:MET:CG	1:182:I:LYS:CE	9	0.25
(1,1780)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	3	0.25
(1,1508)	1:190:J:LEU:CD1	1:161:J:PHE:CA	10	0.25
(1,1431)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CA	8	0.25
(1,1327)	1:153:L:ILE:CG1	1:148:L:THR:CB	3	0.25
(1,1299)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CB	8	0.25
(1,1112)	1:191:H:VAL:CG1	1:194:H:ALA:C	4	0.25
(1,1053)	1:211:J:LEU:CD2	1:190:J:LEU:C	9	0.25
(1,875)	1:162:I:ARG:CA	1:218:I:CYS:CA	8	0.25
(1,795)	1:190:K:LEU:CG	1:187:K:GLU:CG	6	0.25
(1,628)	1:151:J:LEU:CG	1:153:J:ILE:CB	6	0.25
(1,547)	1:190:J:LEU:CG	1:164:J:TYR:CB	6	0.25
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	4	0.24
(1,2402)	3:302:H:A1CCY:F33	1:196:H:PRO:CA	6	0.24
(1,2363)	3:302:H:A1CCY:F31	1:223:H:GLY:CA	4	0.24
(1,2353)	3:302:H:A1CCY:H9A	1:232:I:ALA:CA	10	0.24
(1,2353)	3:302:H:A1CCY:H9B	1:232:I:ALA:CA	10	0.24
(1,2311)	2:301:H:IHP:O44	3:302:H:A1CCY:F32	4	0.24
(1,2161)	1:223:H:GLY:CA	1:157:G:PRO:CD	7	0.24
(1,2066)	1:204:J:ALA:CB	1:206:J:GLY:C	6	0.24
(1,2066)	1:204:J:ALA:CB	1:206:J:GLY:C	10	0.24
(1,1945)	1:165:J:VAL:CB	1:211:J:LEU:CB	4	0.24
(1,1936)	1:160:H:PRO:CD	1:155:H:GLN:CA	6	0.24
(1,1877)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	3	0.24
(1,1782)	1:185:G:MET:CG	1:182:G:LYS:CE	6	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	1	0.24
(1,1676)	1:217:G:ALA:CB	1:215:G:MET:CB	7	0.24
(1,1551)	1:174:K:ALA:CB	1:182:K:LYS:CE	6	0.24
(1,1397)	1:175:J:GLU:CB	1:148:J:THR:CB	10	0.24
(1,1306)	1:153:L:ILE:CG2	1:169:L:TYR:C	6	0.24
(1,1024)	1:189:J:LEU:CG	1:184:J:TRP:CD2	9	0.24
(1,742)	1:202:H:LEU:CG	1:194:H:ALA:CA	6	0.24
(1,505)	1:150:J:ILE:CG2	1:182:J:LYS:C	1	0.24
(1,475)	1:215:J:MET:CG	1:219:J:GLN:C	9	0.24
(2,119)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:H12A	6	0.23
(2,119)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:H12B	6	0.23
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	7	0.23
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	7	0.23
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	4	0.23
(1,2371)	3:302:H:A1CCY:F31	1:197:H:ASP:CA	9	0.23
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	2	0.23
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	7	0.23
(1,2161)	1:223:H:GLY:CA	1:157:G:PRO:CD	9	0.23
(1,2151)	1:219:G:GLN:CG	1:155:L:GLN:CA	6	0.23
(1,2143)	1:156:J:GLY:CA	1:160:K:PRO:CD	10	0.23
(1,2142)	1:156:I:GLY:CA	1:160:J:PRO:CD	7	0.23
(1,1976)	1:148:I:THR:CA	1:174:I:ALA:C	2	0.23
(1,1776)	1:205:K:LEU:CD1	1:210:K:THR:CA	10	0.23
(1,1725)	1:214:H:MET:CG	1:207:H:PRO:CA	8	0.23
(1,1707)	1:190:L:LEU:CD1	1:202:L:LEU:CG	6	0.23
(1,1551)	1:174:K:ALA:CB	1:182:K:LYS:CE	2	0.23
(1,1508)	1:190:H:LEU:CD1	1:161:H:PHE:CA	5	0.23
(1,1348)	1:197:K:ASP:CB	1:218:K:CYS:CA	2	0.23
(1,1342)	1:153:J:ILE:CD1	1:151:J:LEU:C	4	0.23
(1,1342)	1:153:K:ILE:CD1	1:151:K:LEU:C	6	0.23
(1,1321)	1:153:K:ILE:CG2	1:164:K:TYR:CA	3	0.23
(1,1304)	1:157:H:PRO:CG	1:197:H:ASP:CB	5	0.23
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	4	0.23
(1,920)	1:153:K:ILE:CD1	1:193:K:ASN:CG	5	0.23
(1,920)	1:153:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	6	0.23
(1,905)	1:155:I:GLN:CG	1:165:I:VAL:CA	5	0.23
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	6	0.23
(1,719)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	10	0.23
(1,506)	1:156:K:GLY:CA	1:164:K:TYR:CA	4	0.23
(1,487)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	1	0.23
(1,2330)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F33	7	0.22
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	9	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	8	0.22
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ1	1	0.22
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ2	1	0.22
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ3	1	0.22
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	6	0.22
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	6	0.22
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	6	0.22
(1,1997)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	1	0.22
(1,1712)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	10	0.22
(1,1592)	1:153:K:ILE:CB	1:193:K:ASN:CA	4	0.22
(1,1516)	1:153:G:ILE:CB	1:167:G:ARG:CZ	7	0.22
(1,1508)	1:190:H:LEU:CD1	1:161:H:PHE:CA	6	0.22
(1,1469)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	7	0.22
(1,1206)	1:172:I:LEU:CD1	1:189:I:LEU:CG	6	0.22
(1,1197)	1:185:H:MET:CE	1:189:H:LEU:CG	1	0.22
(1,1166)	1:191:H:VAL:CG1	1:193:H:ASN:CA	10	0.22
(1,1141)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CG	1	0.22
(1,1086)	1:217:H:ALA:CB	1:213:H:GLU:CG	5	0.22
(1,1053)	1:211:L:LEU:CD2	1:190:L:LEU:C	4	0.22
(1,859)	1:171:I:THR:CA	1:168:I:PHE:CG	5	0.22
(1,823)	1:177:L:ALA:CB	1:185:L:MET:CA	3	0.22
(1,719)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	2	0.22
(1,614)	1:161:K:PHE:CD1	1:165:K:VAL:C	2	0.22
(1,547)	1:190:I:LEU:CG	1:164:I:TYR:CB	9	0.22
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	1	0.21
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	1	0.21
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	5	0.21
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	5	0.21
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9A	1:232:H:ALA:CA	3	0.21
(1,2391)	3:302:H:A1CCY:H9B	1:232:H:ALA:CA	3	0.21
(1,2343)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:I:LYS:CA	2	0.21
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	10	0.21
(1,2224)	2:301:H:IHP:P5	1:227:K:LYS:HD2	6	0.21
(1,2224)	2:301:H:IHP:P5	1:227:K:LYS:HD3	6	0.21
(1,2143)	1:156:J:GLY:CA	1:160:K:PRO:CD	1	0.21
(1,2122)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	7	0.21
(1,2035)	1:198:I:CYS:CB	1:214:I:MET:CA	7	0.21
(1,2006)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	4	0.21
(1,1922)	1:193:I:ASN:CB	1:188:I:THR:C	3	0.21
(1,1676)	1:217:H:ALA:CB	1:215:H:MET:CB	5	0.21
(1,1508)	1:190:K:LEU:CD1	1:161:K:PHE:CA	3	0.21
(1,1327)	1:153:J:ILE:CG1	1:148:J:THR:CB	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1052)	1:205:I:LEU:CB	1:208:I:GLY:CA	9	0.21
(1,1024)	1:189:J:LEU:CG	1:184:J:TRP:CD2	2	0.21
(1,1024)	1:189:J:LEU:CG	1:184:J:TRP:CD2	5	0.21
(1,898)	1:201:K:ILE:CD1	1:161:K:PHE:CD1	1	0.21
(1,729)	1:150:L:ILE:CD1	1:190:L:LEU:CD1	7	0.21
(1,694)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	6	0.21
(1,628)	1:151:I:LEU:CG	1:153:I:ILE:CB	9	0.21
(1,580)	1:211:H:LEU:CD1	1:212:H:GLU:CD	10	0.21
(1,484)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	5	0.21
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9A	3	0.2
(2,11)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H9B	3	0.2
(1,2352)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CB	2	0.2
(1,2343)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:I:LYS:CA	4	0.2
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ1	3	0.2
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ2	3	0.2
(1,2236)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HZ3	3	0.2
(1,2162)	1:162:L:ARG:CG	1:152:K:ASP:CB	2	0.2
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	5	0.2
(1,2141)	1:156:H:GLY:CA	1:160:I:PRO:CD	6	0.2
(1,1922)	1:193:I:ASN:CB	1:188:I:THR:C	9	0.2
(1,1780)	1:217:J:ALA:CB	1:221:J:VAL:CG2	7	0.2
(1,1592)	1:153:I:ILE:CB	1:193:I:ASN:CA	8	0.2
(1,1404)	1:158:I:LYS:CD	1:159:I:GLU:CD	2	0.2
(1,1327)	1:153:L:ILE:CG1	1:148:L:THR:CB	5	0.2
(1,1321)	1:153:J:ILE:CG2	1:164:J:TYR:CA	10	0.2
(1,1141)	1:151:I:LEU:CG	1:189:I:LEU:CG	7	0.2
(1,879)	1:230:H:VAL:CG2	1:221:H:VAL:CA	7	0.2
(1,601)	1:187:J:GLU:CA	1:169:J:TYR:CE1	8	0.2
(1,506)	1:156:K:GLY:CA	1:164:K:TYR:CA	2	0.2
(1,505)	1:150:K:ILE:CG2	1:182:K:LYS:C	7	0.2
(1,487)	1:165:L:VAL:CG2	1:202:L:LEU:CG	4	0.2
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	9	0.19
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	9	0.19
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	10	0.19
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	10	0.19
(1,2410)	3:302:H:A1CCY:F32	1:221:H:VAL:CA	10	0.19
(1,2370)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CA	8	0.19
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	6	0.19
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	2	0.19
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	5	0.19
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	4	0.19
(1,2307)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F33	8	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	3	0.19
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	3	0.19
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	1	0.19
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	1	0.19
(1,2206)	1:219:I:GLN:CG	1:195:H:ASN:CA	3	0.19
(1,2157)	1:223:L:GLY:CA	1:157:K:PRO:CD	1	0.19
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	6	0.19
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	3	0.19
(1,2106)	1:150:I:ILE:CG1	1:175:I:GLU:CB	8	0.19
(1,2064)	1:160:L:PRO:CG	1:161:L:PHE:CG	4	0.19
(1,1841)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	3	0.19
(1,1780)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	6	0.19
(1,1736)	1:219:L:GLN:CB	1:160:L:PRO:CA	7	0.19
(1,1592)	1:153:H:ILE:CB	1:193:H:ASN:CA	2	0.19
(1,1518)	1:154:J:ARG:CG	1:151:J:LEU:CA	8	0.19
(1,1357)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	3	0.19
(1,1327)	1:153:L:ILE:CG1	1:148:L:THR:CB	2	0.19
(1,1272)	1:160:K:PRO:CB	1:161:K:PHE:CD2	10	0.19
(1,1249)	1:190:K:LEU:CA	1:165:K:VAL:CA	10	0.19
(1,1166)	1:191:H:VAL:CG1	1:193:H:ASN:CA	6	0.19
(1,898)	1:201:J:ILE:CD1	1:161:J:PHE:CD1	7	0.19
(1,859)	1:171:G:THR:CA	1:168:G:PHE:CG	7	0.19
(1,742)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	2	0.19
(1,742)	1:202:J:LEU:CG	1:194:J:ALA:CA	4	0.19
(1,570)	1:156:L:GLY:CA	1:196:L:PRO:CD	8	0.19
(1,506)	1:156:I:GLY:CA	1:164:I:TYR:CA	8	0.19
(1,475)	1:215:K:MET:CG	1:219:K:GLN:C	10	0.19
(1,2410)	3:302:H:A1CCY:F32	1:221:H:VAL:CA	6	0.18
(1,2410)	3:302:H:A1CCY:F32	1:221:H:VAL:CA	9	0.18
(1,2393)	3:302:H:A1CCY:H12A	1:232:H:ALA:CB	10	0.18
(1,2393)	3:302:H:A1CCY:H12B	1:232:H:ALA:CB	10	0.18
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	8	0.18
(1,2352)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CB	4	0.18
(1,2352)	3:302:H:A1CCY:H11	1:231:I:LEU:CB	8	0.18
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ1	6	0.18
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ2	6	0.18
(1,2257)	2:301:H:IHP:P1	1:158:L:LYS:HZ3	6	0.18
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD2	5	0.18
(1,2228)	2:301:H:IHP:P5	1:224:K:PRO:HD3	5	0.18
(1,2206)	1:219:I:GLN:CG	1:195:H:ASN:CA	2	0.18
(1,1945)	1:165:I:VAL:CB	1:211:I:LEU:CB	6	0.18
(1,1922)	1:193:J:ASN:CB	1:188:J:THR:C	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1725)	1:214:H:MET:CG	1:207:H:PRO:CA	4	0.18
(1,1712)	1:172:H:LEU:CD1	1:183:H:ASN:CB	9	0.18
(1,1342)	1:153:K:ILE:CD1	1:151:K:LEU:C	2	0.18
(1,1304)	1:157:H:PRO:CG	1:197:H:ASP:CB	7	0.18
(1,1197)	1:185:G:MET:CE	1:189:G:LEU:CG	2	0.18
(1,1141)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CG	6	0.18
(1,1076)	1:244:L:ILE:CG1	1:238:L:VAL:CA	2	0.18
(1,1023)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	8	0.18
(1,850)	1:150:J:ILE:CG1	1:171:J:THR:CA	7	0.18
(1,699)	1:177:J:ALA:CB	1:172:J:LEU:CG	2	0.18
(1,580)	1:211:I:LEU:CD1	1:212:I:GLU:CD	4	0.18
(1,547)	1:190:H:LEU:CG	1:164:H:TYR:CB	3	0.18
(1,475)	1:215:J:MET:CG	1:219:J:GLN:C	2	0.18
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	8	0.17
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	3	0.17
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	3	0.17
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	8	0.17
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	8	0.17
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9A	1	0.17
(2,28)	2:301:H:IHP:O22	3:302:H:A1CCY:H9B	1	0.17
(1,2404)	3:302:H:A1CCY:F32	1:222:H:GLY:CA	5	0.17
(1,2374)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:H:LYS:CA	4	0.17
(1,2204)	1:219:K:GLN:CG	1:195:J:ASN:CA	3	0.17
(1,2160)	1:223:I:GLY:CA	1:157:H:PRO:CD	2	0.17
(1,2154)	1:219:J:GLN:CG	1:155:I:GLN:CA	7	0.17
(1,2036)	1:190:J:LEU:CD1	1:194:J:ALA:C	9	0.17
(1,1945)	1:165:I:VAL:CB	1:211:I:LEU:CB	7	0.17
(1,1943)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CB	9	0.17
(1,1841)	1:172:J:LEU:CG	1:183:J:ASN:CA	1	0.17
(1,1796)	1:162:G:ARG:CG	1:161:G:PHE:CD1	1	0.17
(1,1508)	1:190:H:LEU:CD1	1:161:H:PHE:CA	7	0.17
(1,1359)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	4	0.17
(1,1342)	1:153:J:ILE:CD1	1:151:J:LEU:C	1	0.17
(1,1336)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	6	0.17
(1,1249)	1:190:K:LEU:CA	1:165:K:VAL:CA	6	0.17
(1,1206)	1:172:L:LEU:CD1	1:189:L:LEU:CG	1	0.17
(1,1148)	1:205:L:LEU:CG	1:218:L:CYS:CA	1	0.17
(1,1107)	1:150:L:ILE:CG2	1:168:L:PHE:C	9	0.17
(1,1035)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	6	0.17
(1,875)	1:162:L:ARG:CA	1:218:L:CYS:CA	4	0.17
(1,796)	1:168:K:PHE:CB	1:189:K:LEU:CB	2	0.17
(1,758)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CD2	6	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,758)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CD2	9	0.17
(1,716)	1:194:I:ALA:CB	1:154:I:ARG:CG	3	0.17
(1,699)	1:177:L:ALA:CB	1:172:L:LEU:CG	10	0.17
(1,580)	1:211:I:LEU:CD1	1:212:I:GLU:CD	7	0.17
(1,506)	1:156:L:GLY:CA	1:164:L:TYR:CA	1	0.17
(1,115)	1:194:K:ALA:N	1:153:K:ILE:CG2	7	0.17
(1,115)	1:194:L:ALA:N	1:153:L:ILE:CG2	10	0.17
(1,2397)	3:302:H:A1CCY:F31	1:157:H:PRO:CG	8	0.16
(1,2330)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F33	6	0.16
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD2	9	0.16
(1,2234)	2:301:H:IHP:P4	1:224:L:PRO:HD3	9	0.16
(1,2141)	1:156:H:GLY:CA	1:160:I:PRO:CD	3	0.16
(1,2129)	1:195:H:ASN:CA	1:219:I:GLN:CA	2	0.16
(1,2027)	1:189:G:LEU:CB	1:153:G:ILE:CA	3	0.16
(1,1932)	1:153:I:ILE:CG1	1:193:I:ASN:CB	10	0.16
(1,1782)	1:185:H:MET:CG	1:182:H:LYS:CE	1	0.16
(1,1780)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	4	0.16
(1,1780)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	10	0.16
(1,1742)	1:180:K:GLU:CG	1:184:K:TRP:CA	7	0.16
(1,1648)	1:190:I:LEU:CD1	1:155:I:GLN:CG	3	0.16
(1,1648)	1:190:I:LEU:CD1	1:155:I:GLN:CG	6	0.16
(1,1376)	1:183:L:ASN:CA	1:178:L:SER:C	5	0.16
(1,1337)	1:197:K:ASP:CB	1:222:K:GLY:C	6	0.16
(1,1310)	1:150:H:ILE:CD1	1:193:H:ASN:CG	5	0.16
(1,1272)	1:160:G:PRO:CB	1:161:G:PHE:CD2	6	0.16
(1,1112)	1:191:H:VAL:CG1	1:194:H:ALA:C	1	0.16
(1,1112)	1:191:H:VAL:CG1	1:194:H:ALA:C	6	0.16
(1,798)	1:150:I:ILE:CD1	1:151:I:LEU:CD1	9	0.16
(1,770)	1:155:H:GLN:CG	1:196:H:PRO:CD	7	0.16
(1,749)	1:211:I:LEU:CD1	1:169:I:TYR:CD2	6	0.16
(1,749)	1:211:I:LEU:CD1	1:169:I:TYR:CD2	10	0.16
(1,506)	1:156:H:GLY:CA	1:164:H:TYR:CA	3	0.16
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	7	0.15
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	1	0.15
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	4	0.15
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	4	0.15
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	4	0.15
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	7	0.15
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	7	0.15
(1,2237)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	7	0.15
(1,2229)	2:301:H:IHP:P5	1:158:I:LYS:HA	6	0.15
(1,2202)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2027)	1:189:K:LEU:CB	1:153:K:ILE:CA	10	0.15
(1,2006)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	6	0.15
(1,1945)	1:165:J:VAL:CB	1:211:J:LEU:CB	2	0.15
(1,1943)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CB	3	0.15
(1,1796)	1:162:H:ARG:CG	1:161:H:PHE:CD1	6	0.15
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	9	0.15
(1,1691)	1:218:G:CYS:CB	1:226:G:HIS:CD2	7	0.15
(1,1404)	1:158:H:LYS:CD	1:159:H:GLU:CD	1	0.15
(1,1404)	1:158:I:LYS:CD	1:159:I:GLU:CD	3	0.15
(1,1404)	1:158:H:LYS:CD	1:159:H:GLU:CD	6	0.15
(1,1299)	1:172:H:LEU:CD1	1:189:H:LEU:CB	9	0.15
(1,1272)	1:160:I:PRO:CB	1:161:I:PHE:CD2	3	0.15
(1,1272)	1:160:J:PRO:CB	1:161:J:PHE:CD2	5	0.15
(1,1233)	1:165:I:VAL:CG1	1:211:I:LEU:CA	2	0.15
(1,859)	1:171:G:THR:CA	1:168:G:PHE:CG	3	0.15
(1,841)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	4	0.15
(1,589)	1:188:H:THR:CG2	1:185:H:MET:CB	7	0.15
(1,394)	1:240:K:ASN:N	1:237:K:GLN:CB	2	0.15
(2,106)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:H21A	6	0.14
(2,106)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:H21B	6	0.14
(2,106)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:H21C	6	0.14
(1,2410)	3:302:H:A1CCY:F32	1:221:H:VAL:CA	2	0.14
(1,2158)	1:223:K:GLY:CA	1:157:J:PRO:CD	1	0.14
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	2	0.14
(1,2106)	1:150:L:ILE:CG1	1:175:L:GLU:CB	9	0.14
(1,2036)	1:190:K:LEU:CD1	1:194:K:ALA:C	2	0.14
(1,1976)	1:148:J:THR:CA	1:174:J:ALA:C	9	0.14
(1,1877)	1:153:K:ILE:CG2	1:165:K:VAL:C	2	0.14
(1,1725)	1:214:K:MET:CG	1:207:K:PRO:CA	9	0.14
(1,1712)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	1	0.14
(1,1707)	1:190:J:LEU:CD1	1:202:J:LEU:CG	4	0.14
(1,1691)	1:218:H:CYS:CB	1:226:H:HIS:CD2	9	0.14
(1,1515)	1:150:J:ILE:CD1	1:167:J:ARG:CA	1	0.14
(1,1508)	1:190:H:LEU:CD1	1:161:H:PHE:CA	2	0.14
(1,1359)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	5	0.14
(1,1272)	1:160:J:PRO:CB	1:161:J:PHE:CD2	9	0.14
(1,1035)	1:187:L:GLU:CB	1:184:L:TRP:CE2	8	0.14
(1,982)	1:150:J:ILE:CD1	1:186:J:THR:CB	6	0.14
(1,920)	1:153:I:ILE:CD1	1:193:I:ASN:CG	10	0.14
(1,905)	1:155:L:GLN:CG	1:165:L:VAL:CA	7	0.14
(1,770)	1:155:J:GLN:CG	1:196:J:PRO:CD	8	0.14
(1,758)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CD2	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,751)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	3	0.14
(1,699)	1:177:J:ALA:CB	1:172:J:LEU:CG	5	0.14
(1,570)	1:156:I:GLY:CA	1:196:I:PRO:CD	1	0.14
(1,532)	1:238:L:VAL:CG2	1:235:L:MET:CB	6	0.14
(1,467)	1:153:J:ILE:CG2	1:167:J:ARG:CG	8	0.14
(2,120)	3:302:H:A1CCY:H27	1:197:H:ASP:N	6	0.13
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	4	0.13
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	4	0.13
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	6	0.13
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	6	0.13
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9A	7	0.13
(2,32)	2:301:H:IHP:O42	3:302:H:A1CCY:H9B	7	0.13
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22A	9	0.13
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22B	9	0.13
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22C	9	0.13
(1,2386)	3:302:H:A1CCY:F32	1:226:H:HIS:CD2	9	0.13
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	10	0.13
(1,2370)	3:302:H:A1CCY:F33	1:159:H:GLU:CA	3	0.13
(1,2367)	3:302:H:A1CCY:F33	1:195:H:ASN:CA	4	0.13
(1,2324)	2:301:H:IHP:O26	3:302:H:A1CCY:F33	1	0.13
(1,2203)	1:219:L:GLN:CG	1:195:K:ASN:CA	6	0.13
(1,2152)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	5	0.13
(1,2145)	1:156:L:GLY:CA	1:160:G:PRO:CD	1	0.13
(1,2129)	1:195:H:ASN:CA	1:219:I:GLN:CA	1	0.13
(1,2036)	1:190:L:LEU:CD1	1:194:L:ALA:C	10	0.13
(1,1932)	1:153:K:ILE:CG1	1:193:K:ASN:CB	7	0.13
(1,1927)	1:167:H:ARG:CD	1:171:H:THR:CA	2	0.13
(1,1910)	1:150:I:ILE:CG2	1:153:I:ILE:CG1	5	0.13
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	9	0.13
(1,1758)	1:185:G:MET:CE	1:175:G:GLU:C	6	0.13
(1,1676)	1:217:L:ALA:CB	1:215:L:MET:CB	8	0.13
(1,1636)	1:171:I:THR:CG2	1:175:I:GLU:CA	4	0.13
(1,1397)	1:175:J:GLU:CB	1:148:J:THR:CB	8	0.13
(1,1384)	1:189:J:LEU:CA	1:153:J:ILE:C	7	0.13
(1,1337)	1:197:K:ASP:CB	1:222:K:GLY:C	9	0.13
(1,1232)	1:218:I:CYS:CB	1:197:I:ASP:CB	3	0.13
(1,1232)	1:218:I:CYS:CB	1:197:I:ASP:CB	5	0.13
(1,1232)	1:218:J:CYS:CB	1:197:J:ASP:CB	8	0.13
(1,1197)	1:185:H:MET:CE	1:189:H:LEU:CG	3	0.13
(1,1108)	1:172:L:LEU:CG	1:169:L:TYR:CZ	9	0.13
(1,1024)	1:189:J:LEU:CG	1:184:J:TRP:CD2	3	0.13
(1,770)	1:155:G:GLN:CG	1:196:G:PRO:CD	1	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,506)	1:156:I:GLY:CA	1:164:I:TYR:CA	6	0.13
(1,475)	1:215:L:MET:CG	1:219:L:GLN:C	5	0.13
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12A	5	0.12
(2,17)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H12B	5	0.12
(1,2374)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:H:LYS:CA	1	0.12
(1,2346)	3:302:H:A1CCY:F31	1:226:I:HIS:CA	7	0.12
(1,2343)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:I:LYS:CA	3	0.12
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ1	1	0.12
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ2	1	0.12
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ3	1	0.12
(1,2155)	1:219:H:GLN:CG	1:155:G:GLN:CA	1	0.12
(1,2143)	1:156:J:GLY:CA	1:160:K:PRO:CD	2	0.12
(1,2036)	1:190:J:LEU:CD1	1:194:J:ALA:C	5	0.12
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	6	0.12
(1,1780)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	9	0.12
(1,1712)	1:172:G:LEU:CD1	1:183:G:ASN:CB	6	0.12
(1,1707)	1:190:I:LEU:CD1	1:202:I:LEU:CG	2	0.12
(1,1691)	1:218:G:CYS:CB	1:226:G:HIS:CD2	10	0.12
(1,1636)	1:171:I:THR:CG2	1:175:I:GLU:CA	7	0.12
(1,1518)	1:154:H:ARG:CG	1:151:H:LEU:CA	5	0.12
(1,1337)	1:197:I:ASP:CB	1:222:I:GLY:C	2	0.12
(1,1310)	1:150:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	3	0.12
(1,1272)	1:160:K:PRO:CB	1:161:K:PHE:CD2	1	0.12
(1,1197)	1:185:H:MET:CE	1:189:H:LEU:CG	7	0.12
(1,1184)	1:233:G:GLU:CG	1:236:G:SER:CA	3	0.12
(1,1035)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	4	0.12
(1,898)	1:201:K:ILE:CD1	1:161:K:PHE:CD1	9	0.12
(1,879)	1:230:H:VAL:CG2	1:221:H:VAL:CA	2	0.12
(1,742)	1:202:J:LEU:CG	1:194:J:ALA:CA	9	0.12
(1,614)	1:161:I:PHE:CD1	1:165:I:VAL:C	5	0.12
(1,570)	1:156:L:GLY:CA	1:196:L:PRO:CD	2	0.12
(1,470)	1:201:I:ILE:CD1	1:216:I:THR:C	7	0.12
(1,467)	1:153:K:ILE:CG2	1:167:K:ARG:CG	2	0.12
(1,115)	1:194:H:ALA:N	1:153:H:ILE:CG2	3	0.12
(1,115)	1:194:I:ALA:N	1:153:I:ILE:CG2	5	0.12
(1,2404)	3:302:H:A1CCY:F32	1:222:H:GLY:CA	3	0.11
(1,2342)	3:302:H:A1CCY:F33	1:223:I:GLY:CA	7	0.11
(1,2329)	2:301:H:IHP:O46	3:302:H:A1CCY:F32	8	0.11
(1,2309)	2:301:H:IHP:O34	3:302:H:A1CCY:F33	6	0.11
(1,2307)	2:301:H:IHP:O24	3:302:H:A1CCY:F33	10	0.11
(1,2292)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:F33	1	0.11
(1,2292)	2:301:H:IHP:O32	3:302:H:A1CCY:F33	5	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ1	5	0.11
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ2	5	0.11
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ3	5	0.11
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ1	9	0.11
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ2	9	0.11
(1,2256)	2:301:H:IHP:P1	1:158:J:LYS:HZ3	9	0.11
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD2	9	0.11
(1,2248)	2:301:H:IHP:P1	1:157:I:PRO:HD3	9	0.11
(1,2206)	1:219:I:GLN:CG	1:195:H:ASN:CA	4	0.11
(1,2156)	1:223:G:GLY:CA	1:157:L:PRO:CD	3	0.11
(1,2154)	1:219:J:GLN:CG	1:155:I:GLN:CA	5	0.11
(1,2036)	1:190:K:LEU:CD1	1:194:K:ALA:C	6	0.11
(1,2027)	1:189:L:LEU:CB	1:153:L:ILE:CA	8	0.11
(1,1902)	1:165:I:VAL:CG2	1:214:I:MET:CA	10	0.11
(1,1771)	1:187:G:GLU:CB	1:191:G:VAL:CB	3	0.11
(1,1707)	1:190:L:LEU:CD1	1:202:L:LEU:CG	1	0.11
(1,1508)	1:190:H:LEU:CD1	1:161:H:PHE:CA	4	0.11
(1,1370)	1:148:G:THR:CB	1:152:G:ASP:CG	2	0.11
(1,1111)	1:207:K:PRO:CG	1:202:K:LEU:CA	6	0.11
(1,1108)	1:172:J:LEU:CG	1:169:J:TYR:CZ	5	0.11
(1,1086)	1:217:L:ALA:CB	1:213:L:GLU:CG	7	0.11
(1,770)	1:155:J:GLN:CG	1:196:J:PRO:CD	5	0.11
(1,770)	1:155:L:GLN:CG	1:196:L:PRO:CD	10	0.11
(1,742)	1:202:K:LEU:CG	1:194:K:ALA:CA	7	0.11
(1,718)	1:161:K:PHE:CD2	1:165:K:VAL:C	2	0.11
(1,716)	1:194:J:ALA:CB	1:154:J:ARG:CG	9	0.11
(1,708)	1:151:K:LEU:CD1	1:153:K:ILE:CB	10	0.11
(1,580)	1:211:L:LEU:CD1	1:212:L:GLU:CD	1	0.11
(1,580)	1:211:H:LEU:CD1	1:212:H:GLU:CD	2	0.11
(1,570)	1:156:H:GLY:CA	1:196:H:PRO:CD	4	0.11
(1,547)	1:190:I:LEU:CG	1:164:I:TYR:CB	7	0.11
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22A	3	0.1
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22B	3	0.1
(2,5)	2:301:H:IHP:O31	3:302:H:A1CCY:H22C	3	0.1
(1,2379)	3:302:H:A1CCY:F33	1:226:H:HIS:CA	2	0.1
(1,2343)	3:302:H:A1CCY:F31	1:227:I:LYS:CA	5	0.1
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD2	10	0.1
(1,2226)	2:301:H:IHP:P5	1:224:H:PRO:HD3	10	0.1
(1,2160)	1:223:I:GLY:CA	1:157:H:PRO:CD	4	0.1
(1,1943)	1:190:J:LEU:CG	1:187:J:GLU:CB	7	0.1
(1,1932)	1:153:K:ILE:CG1	1:193:K:ASN:CB	8	0.1
(1,1932)	1:153:H:ILE:CG1	1:193:H:ASN:CB	9	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1776)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	4	0.1
(1,1752)	1:211:I:LEU:CB	1:212:I:GLU:CD	6	0.1
(1,1636)	1:171:K:THR:CG2	1:175:K:GLU:CA	2	0.1
(1,1431)	1:201:J:ILE:CG2	1:197:J:ASP:CA	6	0.1
(1,1431)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CA	10	0.1
(1,1397)	1:175:J:GLU:CB	1:148:J:THR:CB	4	0.1
(1,1376)	1:183:J:ASN:CA	1:178:J:SER:C	3	0.1
(1,1278)	1:235:L:MET:CB	1:239:L:THR:CA	10	0.1
(1,1148)	1:205:J:LEU:CG	1:218:J:CYS:CA	6	0.1
(1,982)	1:150:J:ILE:CD1	1:186:J:THR:CB	2	0.1
(1,729)	1:150:H:ILE:CD1	1:190:H:LEU:CD1	6	0.1

10 Dihedral-angle violation analysis [i](#)

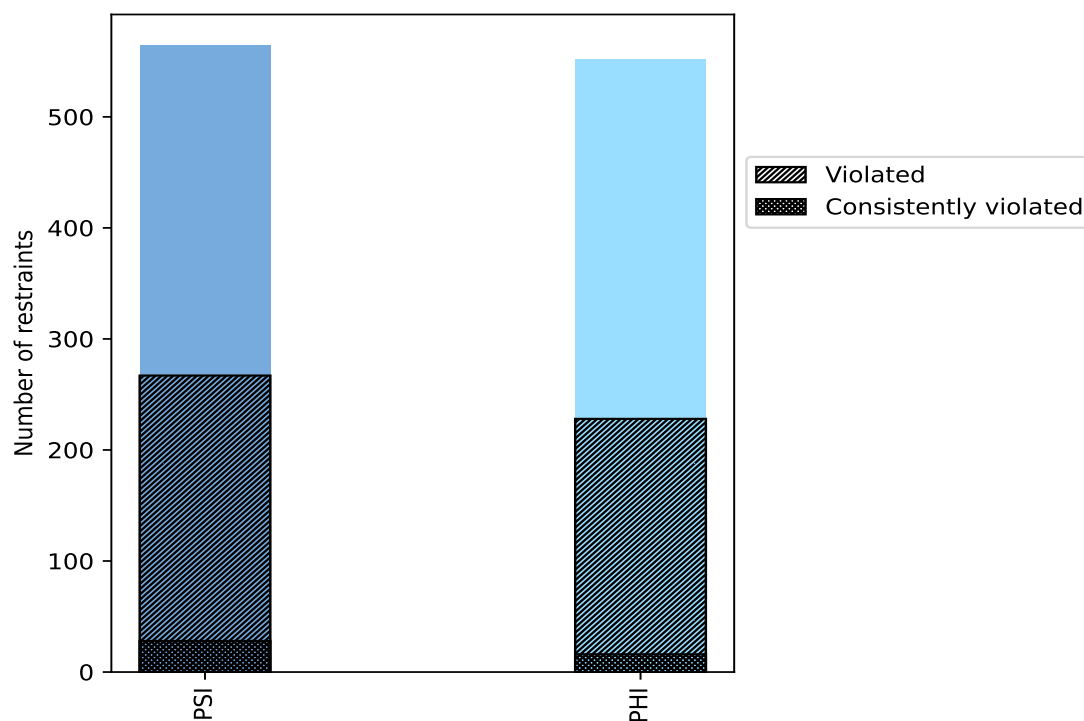
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PSI	564	50.5	267	47.3	23.9	28	5.0	2.5
PHI	552	49.5	228	41.3	20.4	16	2.9	1.4
Total	1116	100.0	495	44.4	44.4	44	3.9	3.9

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

10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations [i](#)



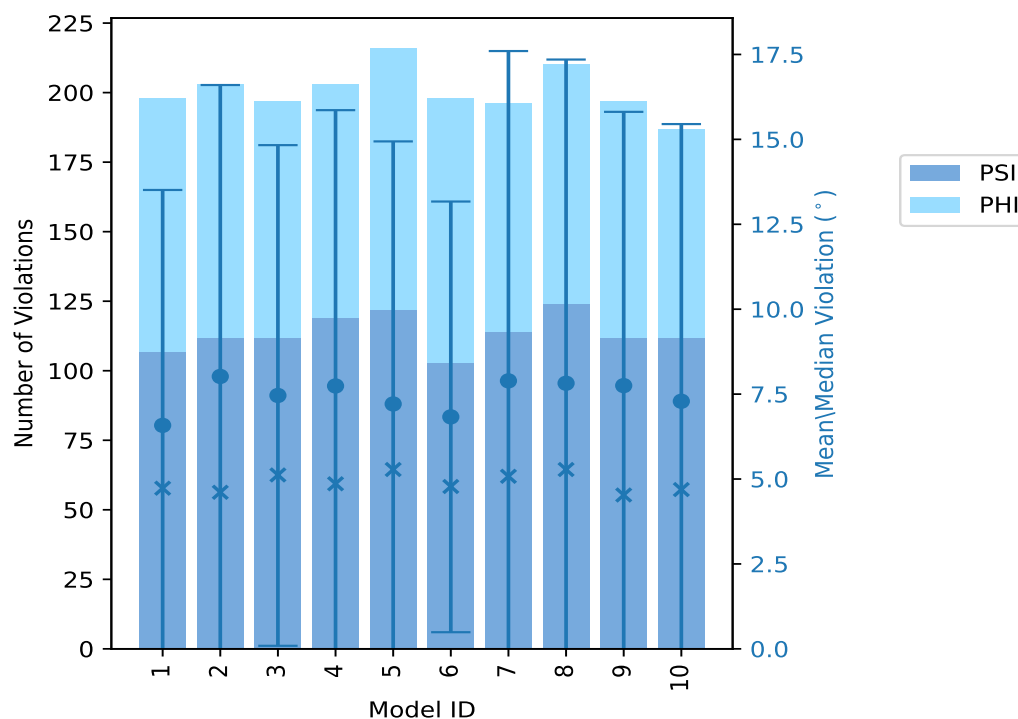
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model [i](#)

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PSI	PHI	Total				
1	107	91	198	6.58	53.71	6.93	4.73
2	112	91	203	8.02	51.42	8.58	4.61
3	112	85	197	7.46	53.06	7.37	5.12
4	119	84	203	7.74	48.8	8.12	4.86
5	122	94	216	7.21	68.89	7.73	5.28
6	103	95	198	6.83	42.41	6.34	4.78
7	114	82	196	7.89	76.27	9.71	5.08
8	124	86	210	7.82	76.04	9.53	5.28
9	112	85	197	7.75	52.39	8.06	4.53
10	112	75	187	7.29	69.9	8.16	4.69

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



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

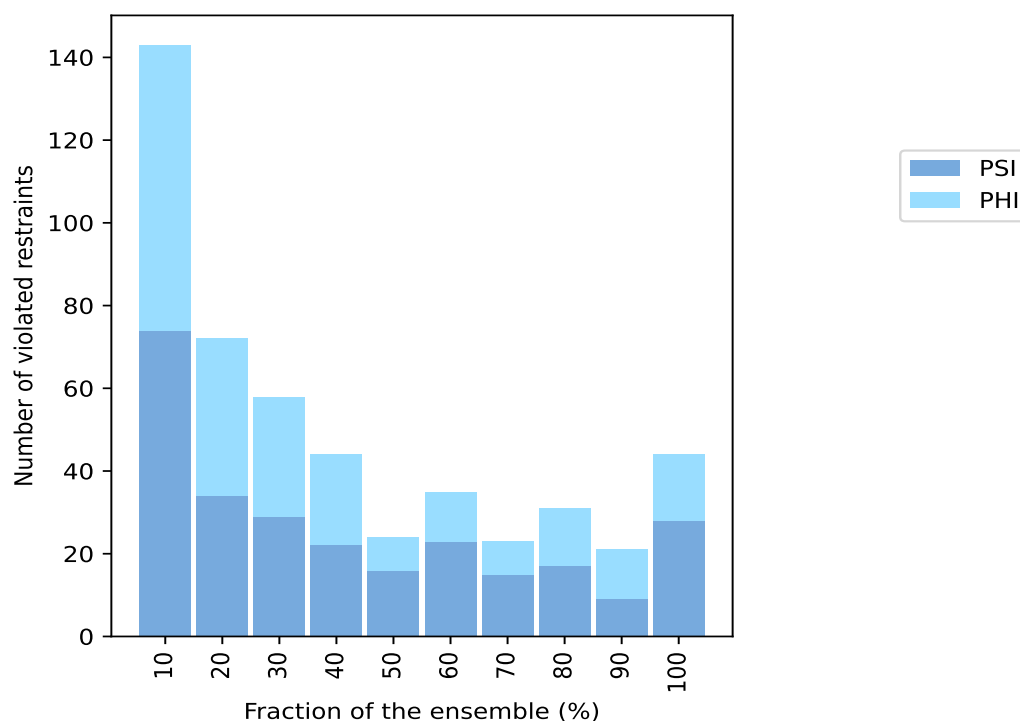
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
74	69	143	1	10.0
34	38	72	2	20.0
29	29	58	3	30.0
22	22	44	4	40.0
16	8	24	5	50.0
23	12	35	6	60.0
15	8	23	7	70.0
17	14	31	8	80.0
9	12	21	9	90.0
28	16	44	10	100.0

¹ Number of models with violations

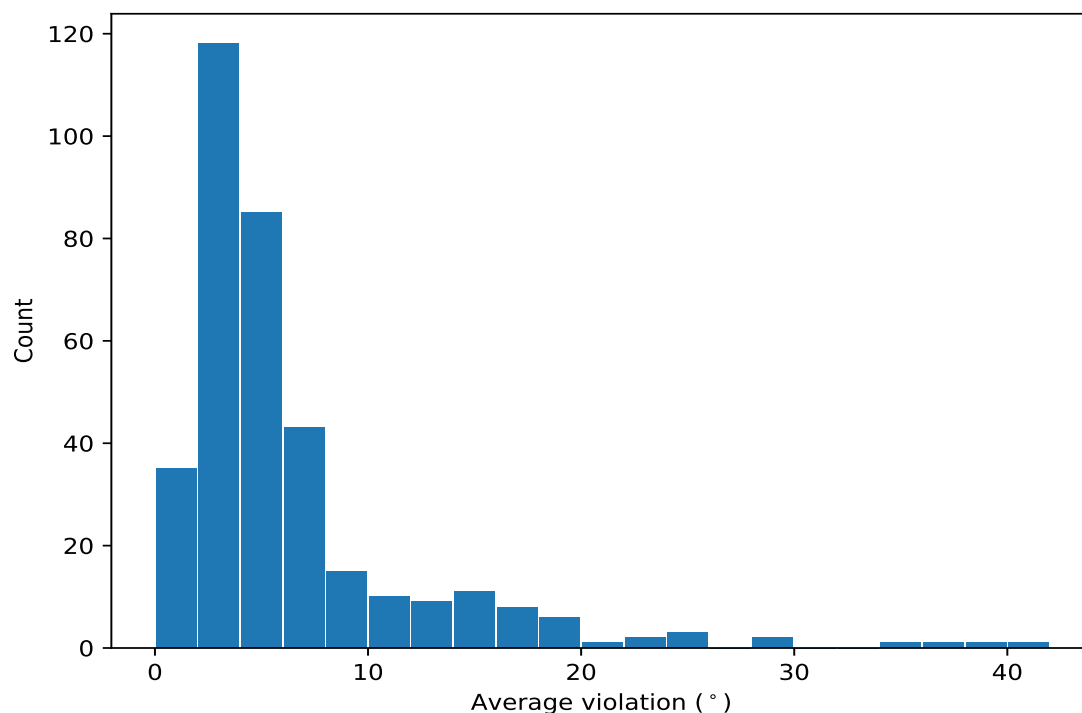
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations [i](#)

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



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints [i](#)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	10	22.35	1.84	22.22
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	10	21.94	2.53	23.06
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	10	19.71	6.96	21.2
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	10	19.39	1.42	19.37
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	10	18.85	4.38	18.35
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	10	17.95	3.73	17.14
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	10	16.5	2.33	16.77
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	10	15.42	2.07	15.62
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	10	14.51	4.09	12.79
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	10	14.41	7.29	16.14
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	10	13.81	3.46	14.73
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	10	12.32	7.87	10.66
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	10	11.81	6.72	10.01

Continued on next page.

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	10	11.76	1.52	11.82
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	10	11.73	2.44	11.08
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	10	11.72	8.69	7.67
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	10	11.66	6.68	9.54
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	10	10.48	5.61	11.16
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	10	9.89	5.36	9.89
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	10	9.64	3.61	9.68
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	10	9.25	3.04	8.77
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	10	8.91	4.01	8.42
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	10	8.28	1.69	7.98
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	10	8.02	2.58	7.6
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	10	7.73	2.71	7.86
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	10	7.38	3.93	7.86
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	10	7.17	2.11	7.94
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	10	7.15	4.48	7.22
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	10	7.04	3.26	8.25
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	10	7.0	3.7	7.71
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	10	6.9	2.68	7.8
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	10	6.89	2.31	8.2
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	10	6.69	2.09	7.24
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	10	6.67	3.1	7.38
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	10	6.59	1.67	6.84
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	10	6.33	2.65	6.85
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	10	5.87	1.8	6.07
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	10	5.75	2.08	5.93
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	10	5.72	2.56	5.23
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	10	5.4	2.1	4.98
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	10	5.21	2.11	4.89
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	10	4.25	1.56	4.16
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	10	3.93	2.14	3.41
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	10	3.2	1.19	3.02
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	9	28.88	17.52	22.39
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	9	24.67	20.06	21.48
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	9	23.18	5.62	23.3
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	9	15.79	6.11	16.6
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	9	14.32	7.34	14.47
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	9	13.95	3.59	13.85
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	9	13.54	6.11	11.98
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	9	13.03	9.15	8.0
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	9	12.07	5.85	13.41
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	9	8.88	3.11	9.42
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	9	7.6	1.15	7.33
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	9	7.18	1.89	7.37
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	9	6.77	2.88	6.87
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	9	6.2	1.99	5.96
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	9	5.5	2.56	5.0
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	9	4.09	1.99	2.76
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	9	3.98	1.58	3.05
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	9	3.93	2.26	3.58
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	9	3.67	1.14	3.57
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	9	3.66	1.38	4.39

Continued on next page.

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	9	1.84	0.61	1.76
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	8	36.61	21.37	41.42
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	8	25.46	20.52	21.31
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	8	17.19	5.96	16.45
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	8	17.12	4.19	19.28
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	8	16.09	2.89	16.2
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	8	15.62	9.76	15.98
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	8	14.27	6.41	16.34
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	8	11.26	3.19	10.5
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	8	10.99	3.44	11.92
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	8	7.81	3.64	6.1
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	8	7.27	6.32	5.48
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	8	6.83	3.73	6.31
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	8	6.36	2.43	5.91
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	8	6.05	1.33	6.24
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	8	5.66	2.5	5.56
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	8	5.34	2.73	4.82
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	8	5.24	1.59	5.53
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	8	5.19	1.18	5.28
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	8	5.12	2.42	5.64
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	8	4.82	1.98	4.54
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	8	4.36	1.63	4.88
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	8	4.18	1.76	4.5
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	8	4.15	1.5	4.53
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	8	3.98	1.4	3.78
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	8	3.31	1.38	3.0
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	8	3.18	1.02	3.52
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	8	3.18	1.63	3.0
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	8	2.66	1.41	2.19
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	8	2.52	1.21	2.68
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	8	2.48	2.35	1.32
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	8	2.19	1.44	1.68
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	7	39.75	18.07	48.8
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	7	35.6	17.65	33.74
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	7	24.67	14.75	24.27
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	7	18.89	7.44	23.35
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	7	9.07	4.02	10.59
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	7	7.53	3.39	8.44
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	7	7.16	2.29	6.08
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	7	7.14	3.59	6.92
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	7	6.97	3.74	5.76
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	7	6.7	3.71	6.0
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	7	6.58	3.0	4.53
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	7	5.87	2.65	5.43
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	7	5.76	2.44	6.29
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	7	5.64	2.05	4.86
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	7	5.54	2.08	5.79
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	7	5.19	2.93	4.56
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	7	4.03	2.22	3.56
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	7	4.0	1.95	3.56
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	7	3.97	2.56	3.63

Continued on next page.

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	7	3.72	2.08	4.74
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	7	3.55	1.25	3.54
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	7	3.31	1.1	3.42
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	7	2.79	1.51	2.53
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	6	29.98	18.58	20.1
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	6	19.98	1.6	20.19
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	6	18.27	13.89	11.82
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	6	16.76	7.77	20.6
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	6	10.23	3.21	9.76
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	6	8.97	3.09	10.2
(1,854)	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	6	8.62	1.1	8.4
(1,1006)	1:238:J:VAL:N	1:238:J:VAL:CA	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	6	7.6	3.19	6.66
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	6	7.23	2.26	6.6
(1,822)	1:222:L:GLY:N	1:222:L:GLY:CA	1:222:L:GLY:C	1:223:L:GLY:N	6	6.98	3.44	6.81
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	6	6.94	4.17	6.36
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	6	6.18	2.37	5.99
(1,847)	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	6	5.95	3.79	5.98
(1,23)	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	6	5.86	2.72	5.5
(1,557)	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	6	5.79	2.74	6.1
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	6	5.72	1.22	5.72
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	6	5.69	1.76	5.99
(1,987)	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	6	5.28	3.45	3.02
(1,821)	1:222:K:GLY:N	1:222:K:GLY:CA	1:222:K:GLY:C	1:223:K:GLY:N	6	5.11	2.14	5.6
(1,15)	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	6	4.96	3.17	4.1
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	6	4.94	1.73	5.49
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	6	4.8	1.44	5.18
(1,461)	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	6	4.57	1.27	4.03
(1,848)	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	6	4.54	3.03	3.12
(1,1004)	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	6	4.52	2.75	4.22
(1,1089)	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	6	4.35	3.2	2.58
(1,1083)	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	6	3.87	2.54	3.4
(1,167)	1:162:K:ARG:N	1:162:K:ARG:CA	1:162:K:ARG:C	1:163:K:ASP:N	6	3.84	1.97	2.66
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	6	3.82	1.99	3.54
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	6	3.65	3.11	2.6
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	6	3.21	1.45	3.36
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	6	3.21	1.77	3.05
(1,55)	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	1:152:G:ASP:N	6	2.96	1.17	2.59
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	6	2.6	1.11	2.7
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	6	1.78	0.78	1.52
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	5	17.93	9.99	14.14
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	5	14.28	5.44	16.22
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	5	12.54	7.26	17.77
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	5	8.18	6.01	5.4
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	5	7.47	6.89	4.28
(1,1003)	1:238:G:VAL:N	1:238:G:VAL:CA	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	5	7.0	3.35	6.82
(1,12)	1:145:L:GLY:C	1:146:L:SER:N	1:146:L:SER:CA	1:146:L:SER:C	5	6.58	3.37	6.46
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	5	6.28	2.93	4.66
(1,824)	1:223:H:GLY:N	1:223:H:GLY:CA	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	5	5.75	4.36	4.51
(1,9)	1:145:I:GLY:C	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	5	5.57	2.73	5.03
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	5	5.24	1.59	4.41
(1,844)	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	5	4.88	1.37	4.27

Continued on next page.

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	5	4.8	3.51	3.49
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	5	4.63	1.49	5.67
(1,992)	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	5	4.45	2.04	4.2
(1,840)	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	5	4.03	1.91	4.51
(1,1109)	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	5	3.8	2.36	2.76
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	5	3.65	2.56	2.73
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	5	3.65	1.96	3.7
(1,456)	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	1:189:L:LEU:N	5	3.07	1.33	2.74
(1,347)	1:179:K:GLN:N	1:179:K:GLN:CA	1:179:K:GLN:C	1:180:K:GLU:N	5	2.87	0.84	2.75
(1,168)	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	5	2.46	0.76	2.77
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	5	2.35	1.96	1.4
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	5	1.82	0.44	1.97
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	4	40.19	33.01	39.7
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	4	17.53	14.82	17.96
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	4	15.76	14.0	13.14
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	4	9.44	1.31	9.57
(1,861)	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	1:227:I:LYS:N	4	9.02	8.14	4.71
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	4	7.8	4.75	7.95
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	4	6.82	0.57	6.81
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	4	5.79	3.18	5.66
(1,11)	1:145:K:GLY:C	1:146:K:SER:N	1:146:K:SER:CA	1:146:K:SER:C	4	5.62	3.52	4.82
(1,467)	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	4	5.21	2.16	4.04
(1,948)	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	1:234:L:ALA:N	4	4.97	0.66	4.88
(1,99)	1:156:I:GLY:C	1:157:I:PRO:N	1:157:I:PRO:CA	1:157:I:PRO:C	4	4.94	1.12	4.87
(1,838)	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	4	4.73	2.79	4.92
(1,853)	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	1:226:G:HIS:CA	1:226:G:HIS:C	4	4.63	2.07	3.94
(1,162)	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	4	4.38	1.71	4.26
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	4	3.91	2.42	3.28
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	4	3.9	0.8	4.15
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	4	3.8	1.87	3.59
(1,649)	1:207:G:PRO:C	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	4	3.72	1.06	4.13
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	4	3.71	1.37	3.32
(1,989)	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	1:237:K:GLN:CA	1:237:K:GLN:C	4	3.62	0.96	3.68
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	4	3.53	1.56	3.18
(1,1005)	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	4	3.52	1.88	2.88
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	4	3.28	1.15	3.07
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	4	3.26	0.9	3.18
(1,465)	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	4	3.18	0.73	3.2
(1,464)	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	4	2.89	1.43	2.47
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	4	2.83	0.99	3.27
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	4	2.82	1.89	1.97
(1,552)	1:197:L:ASP:N	1:197:L:ASP:CA	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	4	2.68	1.47	2.66
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	4	2.67	1.38	2.25
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	4	2.64	1.07	2.38
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	4	2.62	1.02	2.51
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	4	2.55	0.63	2.65
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	4	2.51	1.02	2.59
(1,458)	1:188:H:THR:C	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	4	2.38	0.54	2.4
(1,942)	1:232:L:ALA:C	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	4	2.38	1.16	2.1
(1,362)	1:180:H:GLU:C	1:181:H:VAL:N	1:181:H:VAL:CA	1:181:H:VAL:C	4	2.22	0.33	2.06
(1,836)	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	4	2.21	0.58	2.35

Continued on next page.

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	4	2.16	0.48	2.06
(1,103)	1:157:G:PRO:N	1:157:G:PRO:CA	1:157:G:PRO:C	1:158:G:LYS:N	4	2.05	0.89	2.04
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	4	1.98	0.62	2.16
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	4	1.76	0.5	1.74
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	4	1.34	0.22	1.34
(1,49)	1:150:G:ILE:C	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	3	11.68	5.46	9.21
(1,50)	1:150:H:ILE:C	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	3	9.3	3.93	8.18
(1,69)	1:153:I:ILE:N	1:153:I:ILE:CA	1:153:I:ILE:C	1:154:I:ARG:N	3	8.58	2.37	7.21
(1,1084)	1:175:J:GLU:C	1:176:J:GLN:N	1:176:J:GLN:CA	1:176:J:GLN:C	3	7.9	1.7	7.94
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	3	7.62	6.35	4.62
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	3	5.99	6.25	2.12
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	3	5.6	2.78	7.43
(1,152)	1:161:H:PHE:N	1:161:H:PHE:CA	1:161:H:PHE:C	1:162:H:ARG:N	3	5.54	3.1	5.64
(1,560)	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	1:199:H:LYS:N	3	5.44	2.92	3.41
(1,885)	1:228:I:ALA:N	1:228:I:ALA:CA	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	3	4.97	2.13	5.13
(1,1085)	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	3	4.86	1.32	5.04
(1,10)	1:145:J:GLY:C	1:146:J:SER:N	1:146:J:SER:CA	1:146:J:SER:C	3	4.68	1.58	3.76
(1,842)	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	3	4.54	2.43	3.1
(1,24)	1:146:L:SER:C	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	3	4.39	2.03	4.93
(1,1108)	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	3	4.32	2.07	3.16
(1,977)	1:235:K:MET:C	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	3	4.27	2.07	5.31
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	3	4.18	1.66	3.91
(1,1081)	1:175:G:GLU:C	1:176:G:GLN:N	1:176:G:GLN:CA	1:176:G:GLN:C	3	4.02	1.52	3.59
(1,143)	1:160:K:PRO:N	1:160:K:PRO:CA	1:160:K:PRO:C	1:161:K:PHE:N	3	3.67	1.5	4.24
(1,254)	1:169:H:TYR:C	1:170:H:LYS:N	1:170:H:LYS:CA	1:170:H:LYS:C	3	3.46	1.26	2.99
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	3	3.44	1.28	2.91
(1,431)	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	3	3.41	1.66	4.26
(1,841)	1:224:G:PRO:C	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	3	3.25	1.26	2.81
(1,846)	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	3	3.23	0.33	3.0
(1,468)	1:189:L:LEU:N	1:189:L:LEU:CA	1:189:L:LEU:C	1:190:L:LEU:N	3	3.22	0.9	3.57
(1,252)	1:169:L:TYR:N	1:169:L:TYR:CA	1:169:L:TYR:C	1:170:L:LYS:N	3	3.15	0.75	3.46
(1,852)	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	3	3.12	1.15	2.49
(1,933)	1:232:I:ALA:N	1:232:I:ALA:CA	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	3	3.09	0.84	2.96
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	3	3.07	0.54	3.33
(1,651)	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	3	3.0	0.73	3.07
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	3	2.92	1.12	2.18
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	3	2.85	1.06	3.22
(1,945)	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	1:234:I:ALA:N	3	2.7	1.33	1.89
(1,276)	1:171:L:THR:N	1:171:L:THR:CA	1:171:L:THR:C	1:172:L:LEU:N	3	2.66	0.66	2.2
(1,224)	1:167:H:ARG:N	1:167:H:ARG:CA	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	3	2.62	1.05	2.32
(1,655)	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	1:209:G:ALA:N	3	2.51	0.81	2.04
(1,25)	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	1:148:G:THR:N	3	2.46	1.06	1.87
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	3	2.45	1.37	1.9
(1,588)	1:200:L:THR:N	1:200:L:THR:CA	1:200:L:THR:C	1:201:L:ILE:N	3	2.42	1.44	1.68
(1,238)	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	3	2.39	0.32	2.5
(1,98)	1:156:H:GLY:C	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	3	2.31	0.88	2.77
(1,485)	1:190:K:LEU:C	1:191:K:VAL:N	1:191:K:VAL:CA	1:191:K:VAL:C	3	2.3	0.63	2.32
(1,1092)	1:176:L:GLN:N	1:176:L:GLN:CA	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	3	2.23	1.12	1.44
(1,587)	1:200:K:THR:N	1:200:K:THR:CA	1:200:K:THR:C	1:201:K:ILE:N	3	2.19	0.86	1.72
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	3	2.08	1.29	1.34
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	3	2.04	0.49	2.12

Continued on next page.

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,19)	1:146:G:SER:C	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	3	2.02	0.64	2.22
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	3	1.96	0.22	1.93
(1,457)	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	1:189:G:LEU:CA	1:189:G:LEU:C	3	1.9	0.48	1.96
(1,656)	1:208:H:GLY:N	1:208:H:GLY:CA	1:208:H:GLY:C	1:209:H:ALA:N	3	1.84	0.95	1.29
(1,1088)	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	3	1.71	0.71	1.36
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	3	1.7	0.32	1.49
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	3	1.66	0.62	1.3
(1,657)	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	1:209:I:ALA:N	3	1.65	0.53	1.49
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	3	1.63	0.34	1.73
(1,1060)	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	1:244:J:ILE:CA	1:244:J:ILE:C	3	1.58	0.33	1.41
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	3	1.53	0.22	1.54
(1,799)	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	1:221:G:VAL:N	3	1.35	0.22	1.43
(1,1107)	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	2	15.7	13.44	15.7
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	2	14.6	13.16	14.6
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	2	13.44	3.92	13.44
(1,990)	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	2	13.39	0.16	13.39
(1,22)	1:146:J:SER:C	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	2	6.71	1.2	6.71
(1,856)	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	2	6.66	4.74	6.66
(1,522)	1:194:L:ALA:C	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	2	6.6	0.44	6.6
(1,855)	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	2	5.54	2.76	5.54
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	2	5.5	1.38	5.5
(1,239)	1:168:K:PHE:N	1:168:K:PHE:CA	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	2	5.48	2.06	5.48
(1,473)	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	1:190:K:LEU:CA	1:190:K:LEU:C	2	5.44	0.84	5.44
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	2	5.38	2.22	5.38
(1,371)	1:181:K:VAL:N	1:181:K:VAL:CA	1:181:K:VAL:C	1:182:K:LYS:N	2	5.12	0.4	5.12
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	2	5.1	2.82	5.1
(1,1001)	1:237:K:GLN:C	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	2	5.06	3.69	5.06
(1,792)	1:219:L:GLN:N	1:219:L:GLN:CA	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	2	5.01	0.83	5.01
(1,507)	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	2	4.96	0.34	4.96
(1,304)	1:173:J:ARG:C	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	2	4.96	1.52	4.96
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	2	4.86	0.54	4.86
(1,594)	1:200:L:THR:C	1:201:L:ILE:N	1:201:L:ILE:CA	1:201:L:ILE:C	2	4.62	2.84	4.62
(1,357)	1:180:I:GLU:N	1:180:I:GLU:CA	1:180:I:GLU:C	1:181:I:VAL:N	2	4.62	2.78	4.62
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	2	4.51	2.86	4.51
(1,1110)	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	2	4.38	0.88	4.38
(1,470)	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	2	4.36	0.75	4.36
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	2	4.28	1.37	4.28
(1,729)	1:214:I:MET:N	1:214:I:MET:CA	1:214:I:MET:C	1:215:I:MET:N	2	3.9	0.65	3.9
(1,730)	1:214:J:MET:N	1:214:J:MET:CA	1:214:J:MET:C	1:215:J:MET:N	2	3.71	0.8	3.71
(1,740)	1:215:H:MET:N	1:215:H:MET:CA	1:215:H:MET:C	1:216:H:THR:N	2	3.66	0.74	3.66
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	2	3.59	1.62	3.59
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	2	3.47	1.96	3.47
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	2	3.37	1.15	3.37
(1,275)	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	1:172:K:LEU:N	2	3.29	1.05	3.29
(1,131)	1:159:K:GLU:N	1:159:K:GLU:CA	1:159:K:GLU:C	1:160:K:PRO:N	2	3.14	0.0	3.14
(1,561)	1:198:I:CYS:N	1:198:I:CYS:CA	1:198:I:CYS:C	1:199:I:LYS:N	2	3.12	1.06	3.12
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	2	3.08	0.91	3.08
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	2	3.08	2.01	3.08
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	2	2.96	0.51	2.96
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	2	2.95	1.82	2.95
(1,807)	1:220:I:GLY:C	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	2	2.85	0.58	2.85

Continued on next page.

Continued from previous page...

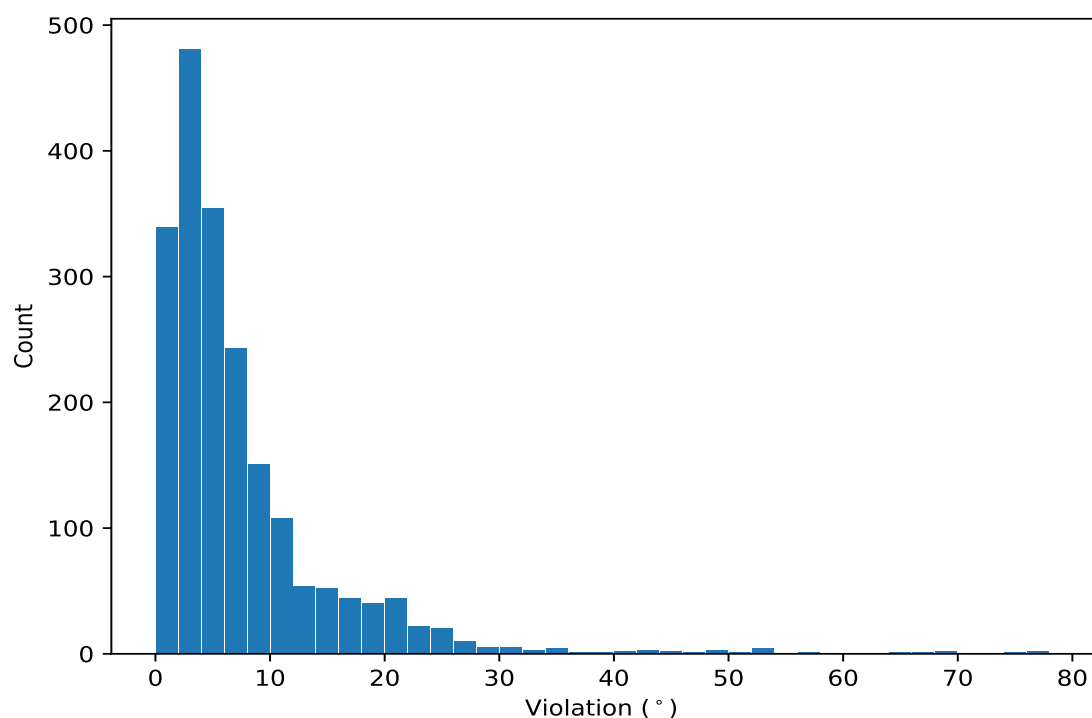
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,816)	1:221:L:VAL:N	1:221:L:VAL:CA	1:221:L:VAL:C	1:222:L:GLY:N	2	2.78	1.63	2.78
(1,670)	1:209:J:ALA:N	1:209:J:ALA:CA	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	2	2.72	0.44	2.72
(1,999)	1:237:I:GLN:C	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	2	2.71	0.7	2.71
(1,616)	1:202:J:LEU:C	1:203:J:LYS:N	1:203:J:LYS:CA	1:203:J:LYS:C	2	2.58	0.75	2.58
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	2	2.56	0.13	2.56
(1,834)	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	2	2.5	0.99	2.5
(1,281)	1:171:K:THR:C	1:172:K:LEU:N	1:172:K:LEU:CA	1:172:K:LEU:C	2	2.46	0.82	2.46
(1,408)	1:184:L:TRP:N	1:184:L:TRP:CA	1:184:L:TRP:C	1:185:L:MET:N	2	2.44	0.68	2.44
(1,502)	1:192:J:GLN:N	1:192:J:GLN:CA	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	2	2.41	1.3	2.41
(1,898)	1:229:J:ARG:N	1:229:J:ARG:CA	1:229:J:ARG:C	1:230:J:VAL:N	2	2.41	1.16	2.41
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	2	2.37	1.12	2.37
(1,829)	1:223:G:GLY:C	1:224:G:PRO:N	1:224:G:PRO:CA	1:224:G:PRO:C	2	2.36	0.7	2.36
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	2	2.32	0.85	2.32
(1,240)	1:168:L:PHE:N	1:168:L:PHE:CA	1:168:L:PHE:C	1:169:L:TYR:N	2	2.3	0.2	2.3
(1,773)	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	1:218:K:CYS:CA	1:218:K:CYS:C	2	2.13	0.07	2.13
(1,21)	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	2	1.92	0.29	1.92
(1,163)	1:162:G:ARG:N	1:162:G:ARG:CA	1:162:G:ARG:C	1:163:G:ASP:N	2	1.92	0.1	1.92
(1,459)	1:188:I:THR:C	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	2	1.92	0.73	1.92
(1,622)	1:203:J:LYS:N	1:203:J:LYS:CA	1:203:J:LYS:C	1:204:J:ALA:N	2	1.83	0.36	1.83
(1,653)	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	2	1.77	0.48	1.77
(1,383)	1:182:K:LYS:N	1:182:K:LYS:CA	1:182:K:LYS:C	1:183:K:ASN:N	2	1.76	0.04	1.76
(1,789)	1:219:I:GLN:N	1:219:I:GLN:CA	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	2	1.76	0.49	1.76
(1,440)	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	2	1.72	0.01	1.72
(1,302)	1:173:H:ARG:C	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	2	1.65	0.37	1.65
(1,668)	1:209:H:ALA:N	1:209:H:ALA:CA	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	2	1.6	0.19	1.6
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	2	1.54	0.52	1.54
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	2	1.53	0.04	1.53
(1,251)	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	1:170:K:LYS:N	2	1.38	0.12	1.38
(1,1076)	1:175:H:GLU:N	1:175:H:GLU:CA	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	2	1.31	0.0	1.31
(1,660)	1:208:L:GLY:N	1:208:L:GLY:CA	1:208:L:GLY:C	1:209:L:ALA:N	2	1.28	0.19	1.28
(1,258)	1:169:L:TYR:C	1:170:L:LYS:N	1:170:L:LYS:CA	1:170:L:LYS:C	2	1.27	0.03	1.27
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	2	1.27	0.26	1.27
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	2	1.18	0.17	1.18

¹ Number of violated models, ²Standard deviation, All angle values are in degree (°)

10.5 All violated dihedral-angle restraints ⓘ

10.5.1 Histogram : Distribution of violations ⓘ

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



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints [i](#)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	7	76.27
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	8	76.04
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	7	75.49
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	10	69.9
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	5	68.89
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	8	66.89
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	5	65.68
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	8	56.26
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1	53.71
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1	53.41
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	3	53.06
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	9	52.39
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	2	51.42
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	2	49.09
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	4	48.8
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	4	48.52
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	7	46.48
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	10	45.56
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	2	45.51
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	8	43.24
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	9	43.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	6	42.41
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	7	41.49
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	4	41.34
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	3	38.91
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	7	37.75
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	9	35.8
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1	35.38
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	2	35.23
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	8	34.27
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	9	33.74
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	7	32.63
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	10	32.01
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	10	31.33
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	6	31.24
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	8	30.4
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	4	30.13
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	2	30.13
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	6	29.67
(1,1107)	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	10	29.14
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	4	28.67
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	7	28.41
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	9	28.16
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	2	27.86
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	2	27.84
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	10	27.77
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	3	27.57
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	10	27.23
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	5	27.0
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	9	26.81
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	2	26.8
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	3	26.31
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	3	26.18
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	2	25.97
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	4	25.84
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	2	25.33
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	4	25.24
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	1	25.19
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	8	25.15
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	9	24.96
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	2	24.91
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	8	24.73
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	10	24.71
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	3	24.7
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	4	24.65
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	3	24.61
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	8	24.57
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	9	24.53
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	8	24.33
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1	24.27
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	4	24.26
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	4	24.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	4	24.19
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	9	23.94
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	2	23.91
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	4	23.9
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	9	23.68
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	6	23.59
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	2	23.51
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	3	23.44
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	9	23.35
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	4	23.31
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	4	23.3
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	2	23.3
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	7	23.14
(1,861)	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	1:227:I:LYS:N	3	23.07
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	5	22.99
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	9	22.87
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	10	22.75
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	4	22.73
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	6	22.57
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	4	22.49
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	8	22.39
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	5	22.39
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	9	22.29
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	3	21.89
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	9	21.84
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	10	21.74
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1	21.73
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	3	21.69
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	8	21.62
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	7	21.61
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	7	21.61
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	2	21.57
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	4	21.55
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	1	21.55
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	2	21.48
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	3	21.48
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	2	21.44
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	9	21.14
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	4	21.14
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	7	21.1
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	8	21.03
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	5	20.99
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	8	20.84
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	5	20.83
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	6	20.79
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	8	20.76
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	9	20.76
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	5	20.76
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	7	20.76
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	2	20.75
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	7	20.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	9	20.67
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1	20.65
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	6	20.65
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	2	20.54
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	6	20.54
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	2	20.54
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	6	20.5
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	3	20.44
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	3	20.42
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	6	20.4
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	4	20.36
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	3	20.31
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	8	20.22
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	5	20.14
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	9	20.07
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	10	20.02
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	3	19.87
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	2	19.83
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	6	19.82
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	9	19.81
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	3	19.69
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	7	19.67
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	9	19.57
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	10	19.56
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	4	19.5
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	3	19.5
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	8	19.44
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	10	19.4
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	5	19.4
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1	19.37
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1	19.34
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	8	19.32
(1,49)	1:150:G:ILE:C	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	6	19.25
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	8	19.24
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	3	19.24
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	2	19.2
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	9	19.17
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	9	19.03
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	6	19.02
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	4	19.0
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	5	18.92
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	4	18.87
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	2	18.79
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	3	18.72
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	9	18.62
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	2	18.5
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	6	18.48
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	9	18.39
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	5	18.32
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	2	18.31
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	10	18.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	4	18.29
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	7	18.22
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	9	18.09
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	6	18.08
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	4	18.06
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	6	17.99
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	9	17.79
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	2	17.77
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	7	17.73
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	2	17.71
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	3	17.71
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	4	17.69
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	2	17.65
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	3	17.61
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	9	17.6
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	4	17.47
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	2	17.44
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	5	17.37
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	5	17.36
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	6	17.2
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	9	17.19
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	10	17.18
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	10	17.17
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	4	17.11
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	8	17.07
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	2	17.01
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	6	16.97
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	8	16.93
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	9	16.86
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	9	16.86
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	9	16.85
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	10	16.81
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	4	16.78
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	4	16.74
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	9	16.73
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	3	16.72
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	3	16.7
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	5	16.6
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	6	16.56
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	9	16.54
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	10	16.45
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	3	16.27
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	4	16.22
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	10	16.2
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	5	16.19
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	4	16.17
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	3	16.15
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	4	16.15
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1	16.05
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	6	15.94
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	8	15.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	6	15.85
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	4	15.76
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	10	15.74
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	3	15.72
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	5	15.67
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	5	15.65
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	2	15.63
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	2	15.58
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	1	15.52
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	2	15.48
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	5	15.48
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	6	15.43
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	7	15.42
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	9	15.41
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	6	15.36
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	10	15.28
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	7	15.24
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	1	15.22
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	9	15.19
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	5	15.18
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	2	15.16
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1	15.13
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	2	15.08
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	5	15.06
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	9	15.05
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	6	14.99
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	7	14.95
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	10	14.93
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	5	14.8
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	4	14.76
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	8	14.72
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	10	14.63
(1,50)	1:150:H:ILE:C	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	2	14.58
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	4	14.58
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	7	14.57
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	2	14.54
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	6	14.53
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	3	14.52
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	2	14.52
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	5	14.51
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	6	14.47
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	8	14.47
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	2	14.46
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	6	14.45
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	6	14.22
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	10	14.14
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	5	14.03
(1,1006)	1:238:J:VAL:N	1:238:J:VAL:CA	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	5	14.02
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	3	14.02
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	3	14.0
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	3	13.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,824)	1:223:H:GLY:N	1:223:H:GLY:CA	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	8	13.95
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	2	13.85
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	4	13.81
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	10	13.7
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	10	13.65
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	5	13.64
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	4	13.62
(1,990)	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	5	13.55
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	7	13.41
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	6	13.38
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	8	13.38
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	6	13.33
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	1	13.33
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	3	13.3
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	6	13.26
(1,990)	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	8	13.23
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	9	13.22
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	7	13.22
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1	13.03
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1	13.01
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	3	13.01
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	2	12.97
(1,847)	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	8	12.94
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	9	12.93
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	10	12.86
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	7	12.71
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	7	12.68
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	3	12.6
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	5	12.59
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	6	12.56
(1,822)	1:222:L:GLY:N	1:222:L:GLY:CA	1:222:L:GLY:C	1:223:L:GLY:N	6	12.51
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	2	12.49
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	8	12.47
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	8	12.45
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	7	12.4
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	7	12.4
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	3	12.36
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1	12.35
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	6	12.31
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	5	12.29
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	7	12.26
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	5	12.25
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	5	12.25
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	4	12.24
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	8	12.22
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	5	12.2
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	3	12.19
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	10	12.17
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	5	12.14
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	1	12.13
(1,12)	1:145:L:GLY:C	1:146:L:SER:N	1:146:L:SER:CA	1:146:L:SER:C	1	12.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	7	12.0
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	7	12.0
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	5	11.98
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	4	11.98
(1,1003)	1:238:G:VAL:N	1:238:G:VAL:CA	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	2	11.94
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	10	11.92
(1,69)	1:153:I:ILE:N	1:153:I:ILE:CA	1:153:I:ILE:C	1:154:I:ARG:N	1	11.91
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	8	11.9
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1	11.9
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	7	11.83
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	3	11.8
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1	11.78
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	7	11.76
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	7	11.73
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	9	11.73
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	5	11.7
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1	11.64
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	7	11.63
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	2	11.61
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	10	11.57
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	5	11.55
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	6	11.55
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	5	11.48
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	1	11.47
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	8	11.45
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	8	11.43
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	9	11.43
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	5	11.42
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	7	11.41
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	1	11.41
(1,856)	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	5	11.4
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	1	11.38
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1	11.33
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	10	11.33
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	9	11.32
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	3	11.27
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	6	11.23
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	3	11.22
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	8	11.21
(1,11)	1:145:K:GLY:C	1:146:K:SER:N	1:146:K:SER:CA	1:146:K:SER:C	2	11.21
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	8	11.21
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	8	11.17
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	2	11.17
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	10	11.17
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	7	11.15
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	9	11.13
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	8	11.06
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	3	11.01
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	1	10.99
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	6	10.96
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	10	10.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	8	10.93
(1,848)	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	2	10.91
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	6	10.9
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	3	10.88
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	3	10.85
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	8	10.82
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	7	10.81
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	7	10.8
(1,833)	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	1:224:K:PRO:CA	1:224:K:PRO:C	3	10.8
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	5	10.8
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	10	10.76
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	7	10.73
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	2	10.73
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	7	10.72
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	5	10.71
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	6	10.69
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	5	10.67
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1	10.64
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	4	10.64
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	5	10.63
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	7	10.59
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	9	10.55
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	3	10.54
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	5	10.53
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	9	10.52
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	7	10.49
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	4	10.48
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	5	10.47
(1,23)	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	8	10.46
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	6	10.45
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	5	10.43
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	3	10.43
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	4	10.39
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	1	10.36
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	2	10.33
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	3	10.32
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	5	10.28
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	3	10.26
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	4	10.25
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	6	10.25
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	1	10.24
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	10	10.23
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	2	10.22
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	6	10.22
(1,987)	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	8	10.2
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	1	10.2
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	6	10.19
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	10	10.19
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	1	10.17
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	10	10.13
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	5	10.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,987)	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	7	10.11
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	7	10.1
(1,557)	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	4	10.1
(1,854)	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	7	10.09
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1	10.08
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	2	10.07
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	4	10.07
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	5	10.04
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1	9.99
(1,1084)	1:175:J:GLU:C	1:176:J:GLN:N	1:176:J:GLN:CA	1:176:J:GLN:C	10	9.97
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	6	9.96
(1,854)	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	5	9.92
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	4	9.91
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	9	9.9
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	1	9.89
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	3	9.87
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	3	9.87
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	4	9.84
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	8	9.79
(1,9)	1:145:I:GLY:C	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	7	9.78
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	4	9.77
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	4	9.76
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	7	9.74
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	6	9.74
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	1	9.74
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	8	9.73
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	10	9.72
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	9	9.69
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	8	9.69
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	7	9.67
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	2	9.67
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	8	9.66
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	5	9.66
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1	9.65
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	3	9.62
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	9	9.6
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	8	9.6
(1,560)	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	1:199:H:LYS:N	5	9.57
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	5	9.56
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	2	9.54
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	3	9.53
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	3	9.53
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	6	9.5
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	7	9.5
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	5	9.49
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	7	9.47
(1,15)	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	4	9.47
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	6	9.46
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	5	9.45
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	9	9.42
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	5	9.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1	9.4
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	4	9.4
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	9	9.35
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	7	9.35
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	5	9.31
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	3	9.3
(1,152)	1:161:H:PHE:N	1:161:H:PHE:CA	1:161:H:PHE:C	1:162:H:ARG:N	7	9.29
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	7	9.25
(1,822)	1:222:L:GLY:N	1:222:L:GLY:CA	1:222:L:GLY:C	1:223:L:GLY:N	10	9.24
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	8	9.22
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	1	9.22
(1,843)	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	10	9.21
(1,49)	1:150:G:ILE:C	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	2	9.21
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1	9.18
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	5	9.18
(1,1089)	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	7	9.16
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	7	9.16
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	8	9.08
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1	9.01
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	9	9.01
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	7	9.0
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	8	8.98
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	10	8.98
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	10	8.97
(1,1004)	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	2	8.96
(1,467)	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	10	8.94
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	6	8.94
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	10	8.93
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	10	8.91
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	10	8.89
(1,232)	1:167:J:ARG:C	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	5	8.87
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	5	8.85
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	2	8.81
(1,1001)	1:237:K:GLN:C	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	6	8.75
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	10	8.73
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	10	8.72
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	7	8.71
(1,15)	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	8	8.69
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	7	8.67
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	6	8.66
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	8	8.65
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	8	8.64
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	1	8.63
(1,1003)	1:238:G:VAL:N	1:238:G:VAL:CA	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	3	8.62
(1,854)	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	3	8.61
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	2	8.61
(1,1006)	1:238:J:VAL:N	1:238:J:VAL:CA	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	7	8.59
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	3	8.59
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	5	8.58
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	2	8.57
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	3	8.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	1	8.55
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	2	8.53
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	1	8.53
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	7	8.52
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	5	8.51
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	7	8.49
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	7	8.48
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	5	8.47
(1,1089)	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	5	8.45
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1	8.45
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	3	8.45
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	7	8.44
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	9	8.44
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	4	8.43
(1,822)	1:222:L:GLY:N	1:222:L:GLY:CA	1:222:L:GLY:C	1:223:L:GLY:N	2	8.43
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	5	8.42
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	8	8.4
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	2	8.38
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1	8.38
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	8	8.37
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	9	8.37
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	7	8.36
(1,514)	1:193:J:ASN:N	1:193:J:ASN:CA	1:193:J:ASN:C	1:194:J:ALA:N	10	8.36
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	4	8.36
(1,1109)	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	8	8.35
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	1	8.35
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	2	8.35
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	4	8.31
(1,855)	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	8	8.3
(1,992)	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	2	8.29
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	7	8.29
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	6	8.27
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	10	8.26
(1,1083)	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	4	8.25
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	10	8.23
(1,854)	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	8	8.19
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	8	8.19
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	4	8.18
(1,50)	1:150:H:ILE:C	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	10	8.18
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	8	8.16
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	10	8.14
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	10	8.14
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	8	8.14
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1	8.13
(1,12)	1:145:L:GLY:C	1:146:L:SER:N	1:146:L:SER:CA	1:146:L:SER:C	4	8.13
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	9	8.12
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	5	8.1
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	3	8.09
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	8	8.06
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	10	8.06
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	1	8.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	8	8.05
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	4	8.04
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1	8.01
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	2	8.01
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1	8.0
(1,853)	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	1:226:G:HIS:CA	1:226:G:HIS:C	4	8.0
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	1	7.98
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	1	7.98
(1,842)	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	2	7.96
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	8	7.95
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	9	7.95
(1,1084)	1:175:J:GLU:C	1:176:J:GLN:N	1:176:J:GLN:CA	1:176:J:GLN:C	4	7.94
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	3	7.94
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	9	7.93
(1,838)	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	7	7.93
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	4	7.93
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	4	7.92
(1,854)	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	2	7.91
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	2	7.91
(1,22)	1:146:J:SER:C	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	7	7.91
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	6	7.9
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	3	7.88
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	8	7.87
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	10	7.86
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	8	7.86
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	8	7.84
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	3	7.83
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	2	7.83
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	1	7.82
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	1	7.8
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	7	7.79
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	5	7.77
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	8	7.74
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	8	7.71
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	9	7.71
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1	7.69
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	3	7.69
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	10	7.68
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	8	7.67
(1,551)	1:197:K:ASP:N	1:197:K:ASP:CA	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	7	7.66
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	8	7.65
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	2	7.64
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	6	7.63
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1	7.62
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	8	7.62
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	10	7.61
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	3	7.61
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	4	7.6
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	7	7.6
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	5	7.57
(1,557)	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	5	7.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	6	7.55
(1,239)	1:168:K:PHE:N	1:168:K:PHE:CA	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	9	7.54
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	8	7.52
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	3	7.51
(1,23)	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	10	7.51
(1,885)	1:228:I:ALA:N	1:228:I:ALA:CA	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	9	7.5
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	1	7.49
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	2	7.49
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	3	7.48
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	6	7.47
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1	7.47
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	3	7.47
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	8	7.47
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	7	7.46
(1,821)	1:222:K:GLY:N	1:222:K:GLY:CA	1:222:K:GLY:C	1:223:K:GLY:N	3	7.46
(1,594)	1:200:L:THR:C	1:201:L:ILE:N	1:201:L:ILE:CA	1:201:L:ILE:C	5	7.46
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1	7.43
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	6	7.43
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	2	7.43
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	5	7.43
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	8	7.42
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	1	7.41
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	2	7.41
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	1	7.4
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	4	7.4
(1,357)	1:180:I:GLU:N	1:180:I:GLU:CA	1:180:I:GLU:C	1:181:I:VAL:N	8	7.39
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	7	7.38
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	1	7.37
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	6	7.37
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	8	7.36
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	7	7.36
(1,9)	1:145:I:GLY:C	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	6	7.36
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	5	7.34
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	3	7.34
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	10	7.33
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	7	7.33
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	4	7.32
(1,844)	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	8	7.32
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	10	7.3
(1,847)	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	5	7.29
(1,821)	1:222:K:GLY:N	1:222:K:GLY:CA	1:222:K:GLY:C	1:223:K:GLY:N	7	7.28
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	8	7.28
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	9	7.26
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	4	7.25
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	10	7.25
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	4	7.24
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	5	7.24
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	3	7.24
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	6	7.24
(1,1108)	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	7	7.23
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	5	7.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,167)	1:162:K:ARG:N	1:162:K:ARG:CA	1:162:K:ARG:C	1:163:K:ASP:N	9	7.21
(1,69)	1:153:I:ILE:N	1:153:I:ILE:CA	1:153:I:ILE:C	1:154:I:ARG:N	3	7.21
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	2	7.2
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	3	7.18
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	7	7.16
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	9	7.16
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	3	7.15
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	7	7.14
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	3	7.13
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	5	7.12
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	3	7.12
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	7	7.12
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	5	7.09
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	5	7.09
(1,1006)	1:238:J:VAL:N	1:238:J:VAL:CA	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	2	7.08
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	2	7.05
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	4	7.05
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	4	7.04
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	5	7.04
(1,522)	1:194:L:ALA:C	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	6	7.03
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	3	7.03
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	10	7.02
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	1	7.01
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	6	7.0
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	4	6.98
(1,854)	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	10	6.98
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	8	6.95
(1,23)	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	5	6.95
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	1	6.95
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	5	6.94
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	5	6.92
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	3	6.92
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	2	6.92
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	7	6.91
(1,838)	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	2	6.9
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1	6.9
(1,10)	1:145:J:GLY:C	1:146:J:SER:N	1:146:J:SER:CA	1:146:J:SER:C	6	6.9
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	6	6.89
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	7	6.88
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	9	6.87
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	9	6.84
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	5	6.83
(1,1003)	1:238:G:VAL:N	1:238:G:VAL:CA	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	9	6.82
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	6	6.82
(1,419)	1:185:K:MET:N	1:185:K:MET:CA	1:185:K:MET:C	1:186:K:THR:N	9	6.82
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	6	6.81
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	5	6.81
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	2	6.8
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	9	6.8
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	3	6.79
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	6	6.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	3	6.75
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	3	6.73
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	5	6.73
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	8	6.73
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	5	6.72
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	6	6.71
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	10	6.71
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	9	6.7
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	4	6.69
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	4	6.65
(1,461)	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	9	6.64
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	7	6.64
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	2	6.63
(1,1004)	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	9	6.62
(1,69)	1:153:I:ILE:N	1:153:I:ILE:CA	1:153:I:ILE:C	1:154:I:ARG:N	10	6.62
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	3	6.61
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	6	6.6
(1,1005)	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	3	6.59
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	7	6.59
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	8	6.59
(1,49)	1:150:G:ILE:C	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	4	6.59
(1,24)	1:146:L:SER:C	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	5	6.57
(1,557)	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	1	6.56
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	4	6.56
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	6	6.55
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	8	6.53
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	9	6.53
(1,162)	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	3	6.52
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	8	6.51
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	10	6.51
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	10	6.5
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	4	6.48
(1,304)	1:173:J:ARG:C	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	7	6.48
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	10	6.46
(1,12)	1:145:L:GLY:C	1:146:L:SER:N	1:146:L:SER:CA	1:146:L:SER:C	9	6.46
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	9	6.44
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	10	6.44
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	8	6.44
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	4	6.43
(1,99)	1:156:I:GLY:C	1:157:I:PRO:N	1:157:I:PRO:CA	1:157:I:PRO:C	3	6.43
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	4	6.42
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	6	6.42
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	2	6.4
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	10	6.4
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	8	6.39
(1,1085)	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	9	6.39
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	4	6.39
(1,165)	1:162:I:ARG:N	1:162:I:ARG:CA	1:162:I:ARG:C	1:163:I:ASP:N	6	6.39
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	6	6.34
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	6	6.34
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	8	6.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	3	6.32
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	4	6.32
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	4	6.31
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	8	6.3
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	3	6.3
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	10	6.29
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	5	6.29
(1,473)	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	1:190:K:LEU:CA	1:190:K:LEU:C	5	6.28
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	8	6.27
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	2	6.27
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	10	6.27
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1	6.27
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	10	6.26
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	9	6.24
(1,1006)	1:238:J:VAL:N	1:238:J:VAL:CA	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	4	6.23
(1,840)	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	8	6.23
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1	6.22
(1,847)	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	7	6.22
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	5	6.22
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	9	6.2
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	4	6.18
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	2	6.16
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	4	6.16
(1,522)	1:194:L:ALA:C	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1	6.16
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1	6.14
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	4	6.13
(1,977)	1:235:K:MET:C	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1	6.12
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	4	6.11
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	2	6.11
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	4	6.11
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	3	6.09
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	4	6.09
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	4	6.09
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	8	6.08
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	4	6.07
(1,1081)	1:175:G:GLU:C	1:176:G:GLN:N	1:176:G:GLN:CA	1:176:G:GLN:C	4	6.06
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	7	6.06
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	6	6.04
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	3	6.04
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	9	6.03
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	7	6.03
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	6	6.03
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	5	6.02
(1,471)	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	7	6.01
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	9	6.0
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	5	5.98
(1,948)	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	1:234:L:ALA:N	7	5.97
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	6	5.97
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	10	5.96
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	5	5.96
(1,461)	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	4	5.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	6	5.96
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	6	5.96
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	6	5.95
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	6	5.94
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	8	5.92
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	9	5.91
(1,167)	1:162:K:ARG:N	1:162:K:ARG:CA	1:162:K:ARG:C	1:163:K:ASP:N	8	5.91
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	7	5.9
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	3	5.9
(1,1083)	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1	5.89
(1,1003)	1:238:G:VAL:N	1:238:G:VAL:CA	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	4	5.89
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	9	5.89
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	7	5.89
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	6	5.88
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	4	5.86
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	5	5.85
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	5	5.85
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	8	5.84
(1,792)	1:219:L:GLN:N	1:219:L:GLN:CA	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	7	5.84
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	8	5.82
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	9	5.82
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	3	5.81
(1,1084)	1:175:J:GLU:C	1:176:J:GLN:N	1:176:J:GLN:CA	1:176:J:GLN:C	9	5.8
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	5	5.8
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	10	5.8
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	6	5.79
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	9	5.79
(1,824)	1:223:H:GLY:N	1:223:H:GLY:CA	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	10	5.79
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	5	5.77
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	10	5.77
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	6	5.77
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	8	5.76
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	10	5.76
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	9	5.76
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	5	5.75
(1,847)	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	1	5.75
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	4	5.75
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	10	5.73
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	3	5.72
(1,821)	1:222:K:GLY:N	1:222:K:GLY:CA	1:222:K:GLY:C	1:223:K:GLY:N	10	5.72
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	10	5.72
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	5	5.71
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	4	5.69
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	2	5.68
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	8	5.67
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	8	5.66
(1,840)	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	3	5.66
(1,557)	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	10	5.65
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	6	5.65
(1,152)	1:161:H:PHE:N	1:161:H:PHE:CA	1:161:H:PHE:C	1:162:H:ARG:N	2	5.64
(1,11)	1:145:K:GLY:C	1:146:K:SER:N	1:146:K:SER:CA	1:146:K:SER:C	6	5.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	2	5.62
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	6	5.62
(1,1006)	1:238:J:VAL:N	1:238:J:VAL:CA	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	3	5.61
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	1	5.61
(1,162)	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	7	5.6
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	5	5.59
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	2	5.58
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	5	5.57
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	4	5.57
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	2	5.57
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	2	5.56
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	10	5.55
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	9	5.55
(1,99)	1:156:I:GLY:C	1:157:I:PRO:N	1:157:I:PRO:CA	1:157:I:PRO:C	6	5.55
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	5	5.54
(1,371)	1:181:K:VAL:N	1:181:K:VAL:CA	1:181:K:VAL:C	1:182:K:LYS:N	7	5.52
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	9	5.51
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	5	5.51
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	2	5.51
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	9	5.51
(1,22)	1:146:J:SER:C	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	8	5.51
(1,861)	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	1:227:I:LYS:N	5	5.5
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1	5.5
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	6	5.5
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	9	5.5
(1,821)	1:222:K:GLY:N	1:222:K:GLY:CA	1:222:K:GLY:C	1:223:K:GLY:N	8	5.49
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	2	5.49
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	5	5.49
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	6	5.47
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	4	5.47
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1	5.47
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	2	5.46
(1,810)	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	1:221:L:VAL:CA	1:221:L:VAL:C	2	5.44
(1,456)	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	1:189:L:LEU:N	7	5.43
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	6	5.43
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	6	5.43
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1	5.41
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	10	5.41
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1	5.4
(1,1004)	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	3	5.4
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	5	5.4
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	9	5.39
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	8	5.39
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	10	5.39
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1	5.37
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	6	5.37
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	9	5.37
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	8	5.37
(1,844)	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	10	5.34
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	10	5.34
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	1	5.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,848)	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	8	5.32
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	10	5.32
(1,977)	1:235:K:MET:C	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	8	5.31
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	5	5.31
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	6	5.3
(1,507)	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	5	5.3
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	8	5.29
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	9	5.29
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	9	5.29
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	4	5.28
(1,1110)	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	8	5.27
(1,15)	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	5	5.27
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	7	5.25
(1,839)	1:224:K:PRO:N	1:224:K:PRO:CA	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	3	5.24
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	1	5.22
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	2	5.21
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	7	5.21
(1,299)	1:173:K:ARG:N	1:173:K:ARG:CA	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	3	5.21
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	7	5.21
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	3	5.2
(1,822)	1:222:L:GLY:N	1:222:L:GLY:CA	1:222:L:GLY:C	1:223:L:GLY:N	4	5.19
(1,476)	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	8	5.19
(1,368)	1:181:H:VAL:N	1:181:H:VAL:CA	1:181:H:VAL:C	1:182:H:LYS:N	5	5.19
(1,254)	1:169:H:TYR:C	1:170:H:LYS:N	1:170:H:LYS:CA	1:170:H:LYS:C	1	5.18
(1,938)	1:232:H:ALA:C	1:233:H:GLU:N	1:233:H:GLU:CA	1:233:H:GLU:C	2	5.17
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	9	5.16
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	5	5.16
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	10	5.15
(1,300)	1:173:L:ARG:N	1:173:L:ARG:CA	1:173:L:ARG:C	1:174:L:ALA:N	2	5.15
(1,143)	1:160:K:PRO:N	1:160:K:PRO:CA	1:160:K:PRO:C	1:161:K:PHE:N	8	5.15
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	9	5.15
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	1	5.14
(1,50)	1:150:H:ILE:C	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	6	5.14
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1	5.13
(1,885)	1:228:I:ALA:N	1:228:I:ALA:CA	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	8	5.13
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	3	5.12
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	3	5.12
(1,470)	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	5	5.11
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	3	5.11
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	10	5.11
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	6	5.09
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	7	5.09
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	3	5.08
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1	5.07
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	7	5.07
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1	5.06
(1,1085)	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	4	5.04
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1	5.04
(1,948)	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	1:234:L:ALA:N	9	5.04
(1,464)	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	8	5.04
(1,18)	1:146:L:SER:N	1:146:L:SER:CA	1:146:L:SER:C	1:147:L:PRO:N	8	5.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,9)	1:145:I:GLY:C	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	5	5.03
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	1	5.0
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	1	5.0
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	4	4.99
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	9	4.98
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	5	4.98
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	5	4.97
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	7	4.97
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	7	4.96
(1,1070)	1:174:H:ALA:C	1:175:H:GLU:N	1:175:H:GLU:CA	1:175:H:GLU:C	7	4.96
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	8	4.96
(1,841)	1:224:G:PRO:C	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	8	4.96
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	8	4.96
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	5	4.94
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	6	4.93
(1,24)	1:146:L:SER:C	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	3	4.93
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	8	4.9
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	6	4.9
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1	4.89
(1,431)	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	8	4.88
(1,55)	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	1:152:G:ASP:N	6	4.88
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	4	4.86
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	7	4.85
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	5	4.84
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	4	4.84
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1	4.83
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1	4.82
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	3	4.82
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	6	4.82
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	1	4.8
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	1	4.78
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	4	4.77
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	2	4.77
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	9	4.76
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	4	4.76
(1,903)	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	1:230:I:VAL:CA	1:230:I:VAL:C	2	4.75
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	5	4.74
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1	4.73
(1,852)	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1	4.73
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	5	4.73
(1,520)	1:194:J:ALA:C	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1	4.73
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	6	4.73
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	4	4.73
(1,948)	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	1:234:L:ALA:N	3	4.72
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	6	4.72
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	10	4.71
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	2	4.71
(1,371)	1:181:K:VAL:N	1:181:K:VAL:CA	1:181:K:VAL:C	1:182:K:LYS:N	9	4.71
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	5	4.69
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	10	4.69
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	4	4.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,649)	1:207:G:PRO:C	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	4	4.67
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	2	4.66
(1,507)	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	7	4.63
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	5	4.62
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	2	4.62
(1,853)	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	1:226:G:HIS:CA	1:226:G:HIS:C	2	4.61
(1,989)	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	1:237:K:GLN:CA	1:237:K:GLN:C	8	4.6
(1,473)	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	1:190:K:LEU:CA	1:190:K:LEU:C	1	4.6
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	2	4.59
(1,945)	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	1:234:I:ALA:N	9	4.58
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	8	4.57
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	6	4.56
(1,989)	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	1:237:K:GLN:CA	1:237:K:GLN:C	5	4.55
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	10	4.55
(1,729)	1:214:I:MET:N	1:214:I:MET:CA	1:214:I:MET:C	1:215:I:MET:N	7	4.55
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	7	4.54
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	5	4.53
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	7	4.53
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	2	4.53
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	9	4.53
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	9	4.52
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	2	4.52
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	10	4.52
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	4	4.52
(1,840)	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	5	4.51
(1,824)	1:223:H:GLY:N	1:223:H:GLY:CA	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	9	4.51
(1,730)	1:214:J:MET:N	1:214:J:MET:CA	1:214:J:MET:C	1:215:J:MET:N	8	4.51
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	4	4.51
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	7	4.5
(1,782)	1:218:H:CYS:C	1:219:H:GLN:N	1:219:H:GLN:CA	1:219:H:GLN:C	1	4.49
(1,1059)	1:243:I:THR:C	1:244:I:ILE:N	1:244:I:ILE:CA	1:244:I:ILE:C	6	4.47
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	2	4.47
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1	4.47
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	4	4.46
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	3	4.45
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	8	4.44
(1,588)	1:200:L:THR:N	1:200:L:THR:CA	1:200:L:THR:C	1:201:L:ILE:N	5	4.44
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	7	4.44
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	10	4.43
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	1	4.42
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	4	4.42
(1,816)	1:221:L:VAL:N	1:221:L:VAL:CA	1:221:L:VAL:C	1:222:L:GLY:N	1	4.41
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	1	4.41
(1,740)	1:215:H:MET:N	1:215:H:MET:CA	1:215:H:MET:C	1:216:H:THR:N	5	4.4
(1,552)	1:197:L:ASP:N	1:197:L:ASP:CA	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	4	4.4
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	1	4.4
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	10	4.39
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	8	4.39
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	3	4.38
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	9	4.38
(1,649)	1:207:G:PRO:C	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	7	4.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,510)	1:192:L:GLN:C	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	5	4.38
(1,381)	1:182:I:LYS:N	1:182:I:LYS:CA	1:182:I:LYS:C	1:183:I:ASN:N	6	4.38
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	9	4.38
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	7	4.37
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	5	4.35
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	9	4.34
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	8	4.34
(1,275)	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	1:172:K:LEU:N	4	4.34
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	6	4.33
(1,992)	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	9	4.33
(1,822)	1:222:L:GLY:N	1:222:L:GLY:CA	1:222:L:GLY:C	1:223:L:GLY:N	9	4.33
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	8	4.33
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	7	4.32
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	2	4.32
(1,347)	1:179:K:GLN:N	1:179:K:GLN:CA	1:179:K:GLN:C	1:180:K:GLU:N	1	4.32
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	3	4.3
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1	4.3
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	9	4.3
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	6	4.29
(1,902)	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	7	4.28
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	8	4.28
(1,844)	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	7	4.27
(1,431)	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	9	4.26
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	10	4.26
(1,20)	1:146:H:SER:C	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	8	4.26
(1,942)	1:232:L:ALA:C	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	2	4.25
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	1	4.25
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	10	4.25
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	7	4.24
(1,143)	1:160:K:PRO:N	1:160:K:PRO:CA	1:160:K:PRO:C	1:161:K:PHE:N	9	4.24
(1,246)	1:168:L:PHE:C	1:169:L:TYR:N	1:169:L:TYR:CA	1:169:L:TYR:C	5	4.23
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	3	4.21
(1,992)	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1	4.2
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	9	4.2
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	7	4.19
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	9	4.19
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	5	4.19
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	7	4.19
(1,467)	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	6	4.19
(1,99)	1:156:I:GLY:C	1:157:I:PRO:N	1:157:I:PRO:CA	1:157:I:PRO:C	1	4.19
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	6	4.19
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	7	4.18
(1,933)	1:232:I:ALA:N	1:232:I:ALA:CA	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	9	4.18
(1,792)	1:219:L:GLN:N	1:219:L:GLN:CA	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	2	4.18
(1,561)	1:198:I:CYS:N	1:198:I:CYS:CA	1:198:I:CYS:C	1:199:I:LYS:N	10	4.18
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	2	4.17
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	10	4.17
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	7	4.16
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	10	4.16
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	9	4.15
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	2	4.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	9	4.15
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	1	4.15
(1,55)	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	1:152:G:ASP:N	3	4.15
(1,948)	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	1:234:L:ALA:N	2	4.14
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	8	4.14
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	4	4.14
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	5	4.13
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	7	4.13
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	7	4.13
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	8	4.12
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	10	4.12
(1,844)	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1	4.12
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	2	4.12
(1,465)	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	4	4.12
(1,468)	1:189:L:LEU:N	1:189:L:LEU:CA	1:189:L:LEU:C	1:190:L:LEU:N	5	4.11
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	10	4.11
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	8	4.1
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	10	4.09
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	2	4.09
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	2	4.08
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1	4.08
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	3	4.07
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	5	4.07
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	10	4.07
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	2	4.06
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	4	4.06
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	8	4.06
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	4	4.06
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	4	4.05
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	6	4.05
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	1	4.05
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	1	4.05
(1,1006)	1:238:J:VAL:N	1:238:J:VAL:CA	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	9	4.04
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	6	4.04
(1,461)	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	6	4.04
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	2	4.04
(1,23)	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	6	4.04
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	9	4.03
(1,224)	1:167:H:ARG:N	1:167:H:ARG:CA	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	9	4.03
(1,461)	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	2	4.02
(1,11)	1:145:K:GLY:C	1:146:K:SER:N	1:146:K:SER:CA	1:146:K:SER:C	7	4.02
(1,584)	1:200:H:THR:N	1:200:H:THR:CA	1:200:H:THR:C	1:201:H:ILE:N	8	4.0
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	1	3.99
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	10	3.99
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	7	3.98
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	7	3.97
(1,25)	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	1:148:G:THR:N	7	3.95
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	6	3.93
(1,861)	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	1:227:I:LYS:N	7	3.92
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1	3.92
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	8	3.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	6	3.91
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	7	3.91
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	10	3.9
(1,467)	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	4	3.9
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	10	3.9
(1,287)	1:172:K:LEU:N	1:172:K:LEU:CA	1:172:K:LEU:C	1:173:K:ARG:N	6	3.9
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	5	3.89
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	8	3.89
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	2	3.89
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	8	3.89
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	5	3.89
(1,649)	1:207:G:PRO:C	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	5	3.88
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	4	3.87
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	9	3.87
(1,252)	1:169:L:TYR:N	1:169:L:TYR:CA	1:169:L:TYR:C	1:170:L:LYS:N	9	3.87
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	2	3.87
(1,552)	1:197:L:ASP:N	1:197:L:ASP:CA	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	10	3.86
(1,651)	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	9	3.85
(1,180)	1:163:L:ASP:N	1:163:L:ASP:CA	1:163:L:ASP:C	1:164:L:TYR:N	9	3.85
(1,467)	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	1:190:K:LEU:N	2	3.82
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	10	3.82
(1,1092)	1:176:L:GLN:N	1:176:L:GLN:CA	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	4	3.81
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	7	3.81
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	9	3.8
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1	3.79
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	3	3.79
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	1	3.79
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	9	3.77
(1,10)	1:145:J:GLY:C	1:146:J:SER:N	1:146:J:SER:CA	1:146:J:SER:C	3	3.76
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	10	3.74
(1,993)	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	1:238:I:VAL:N	9	3.72
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	2	3.72
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	3	3.71
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	7	3.71
(1,1083)	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	5	3.7
(1,846)	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	4	3.7
(1,502)	1:192:J:GLN:N	1:192:J:GLN:CA	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	8	3.7
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	10	3.7
(1,23)	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	7	3.69
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	6	3.68
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	3	3.68
(1,1109)	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	2	3.65
(1,655)	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	1:209:G:ALA:N	9	3.65
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	10	3.64
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	8	3.64
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	5	3.64
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	1	3.63
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	2	3.63
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	10	3.63
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	7	3.62
(1,470)	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	7	3.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1007)	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	5	3.6
(1,861)	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	1:227:I:LYS:N	10	3.6
(1,276)	1:171:L:THR:N	1:171:L:THR:CA	1:171:L:THR:C	1:172:L:LEU:N	4	3.6
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	6	3.6
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	9	3.6
(1,12)	1:145:L:GLY:C	1:146:L:SER:N	1:146:L:SER:CA	1:146:L:SER:C	10	3.6
(1,1081)	1:175:G:GLU:C	1:176:G:GLN:N	1:176:G:GLN:CA	1:176:G:GLN:C	3	3.59
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	4	3.59
(1,99)	1:156:I:GLY:C	1:157:I:PRO:N	1:157:I:PRO:CA	1:157:I:PRO:C	10	3.59
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	9	3.58
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	4	3.58
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	7	3.58
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	3	3.57
(1,468)	1:189:L:LEU:N	1:189:L:LEU:CA	1:189:L:LEU:C	1:190:L:LEU:N	3	3.57
(1,465)	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	9	3.57
(1,898)	1:229:J:ARG:N	1:229:J:ARG:CA	1:229:J:ARG:C	1:230:J:VAL:N	1	3.56
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	8	3.56
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	7	3.56
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	3	3.55
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	9	3.55
(1,16)	1:146:J:SER:N	1:146:J:SER:CA	1:146:J:SER:C	1:147:J:PRO:N	9	3.55
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	8	3.54
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	1	3.54
(1,335)	1:178:K:SER:N	1:178:K:SER:CA	1:178:K:SER:C	1:179:K:GLN:N	3	3.53
(1,9)	1:145:I:GLY:C	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	4	3.53
(1,897)	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	2	3.52
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	9	3.52
(1,1110)	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	6	3.5
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	2	3.5
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	3	3.5
(1,461)	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	10	3.5
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	6	3.5
(1,867)	1:226:I:HIS:C	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	3	3.49
(1,834)	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	6	3.49
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	10	3.49
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	8	3.49
(1,1005)	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	9	3.48
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	4	3.48
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	2	3.48
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	2	3.48
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	2	3.48
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	4	3.48
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	5	3.47
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1	3.47
(1,456)	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	1:189:L:LEU:N	5	3.46
(1,252)	1:169:L:TYR:N	1:169:L:TYR:CA	1:169:L:TYR:C	1:170:L:LYS:N	5	3.46
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	7	3.45
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	8	3.45
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	3	3.44
(1,848)	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	5	3.43
(1,807)	1:220:I:GLY:C	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	2	3.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	6	3.43
(1,304)	1:173:J:ARG:C	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	3	3.43
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	9	3.43
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	3	3.42
(1,239)	1:168:K:PHE:N	1:168:K:PHE:CA	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	4	3.42
(1,999)	1:237:I:GLN:C	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	6	3.41
(1,560)	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	1:199:H:LYS:N	2	3.41
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	9	3.4
(1,587)	1:200:K:THR:N	1:200:K:THR:CA	1:200:K:THR:C	1:201:K:ILE:N	7	3.4
(1,234)	1:167:L:ARG:C	1:168:L:PHE:N	1:168:L:PHE:CA	1:168:L:PHE:C	1	3.4
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	8	3.4
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	3	3.39
(1,264)	1:170:L:LYS:N	1:170:L:LYS:CA	1:170:L:LYS:C	1:171:L:THR:N	7	3.39
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	4	3.39
(1,168)	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	5	3.38
(1,10)	1:145:J:GLY:C	1:146:J:SER:N	1:146:J:SER:CA	1:146:J:SER:C	10	3.38
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	5	3.37
(1,844)	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	4	3.36
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	2	3.35
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	10	3.35
(1,616)	1:202:J:LEU:C	1:203:J:LYS:N	1:203:J:LYS:CA	1:203:J:LYS:C	10	3.34
(1,560)	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	1:199:H:LYS:N	1	3.34
(1,1053)	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	1:244:I:ILE:N	10	3.33
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	8	3.33
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	6	3.33
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	1	3.33
(1,464)	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	3	3.32
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	1	3.31
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	4	3.29
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1	3.29
(1,281)	1:171:K:THR:C	1:172:K:LEU:N	1:172:K:LEU:CA	1:172:K:LEU:C	5	3.29
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	9	3.29
(1,853)	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	1:226:G:HIS:CA	1:226:G:HIS:C	9	3.28
(1,461)	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	1:189:K:LEU:CA	1:189:K:LEU:C	5	3.28
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	2	3.27
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	5	3.27
(1,748)	1:215:J:MET:C	1:216:J:THR:N	1:216:J:THR:CA	1:216:J:THR:C	3	3.27
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	8	3.27
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	4	3.26
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	6	3.26
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	2	3.26
(1,987)	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	5	3.25
(1,821)	1:222:K:GLY:N	1:222:K:GLY:CA	1:222:K:GLY:C	1:223:K:GLY:N	4	3.25
(1,729)	1:214:I:MET:N	1:214:I:MET:CA	1:214:I:MET:C	1:215:I:MET:N	5	3.24
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	9	3.23
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	8	3.23
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	8	3.22
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	2	3.22
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	6	3.22
(1,139)	1:160:G:PRO:N	1:160:G:PRO:CA	1:160:G:PRO:C	1:161:G:PHE:N	10	3.22
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	1	3.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	7	3.2
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	7	3.2
(1,1089)	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	1	3.19
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	9	3.17
(1,656)	1:208:H:GLY:N	1:208:H:GLY:CA	1:208:H:GLY:C	1:209:H:ALA:N	10	3.17
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	4	3.17
(1,1108)	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	4	3.16
(1,1085)	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1	3.16
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	10	3.16
(1,670)	1:209:J:ALA:N	1:209:J:ALA:CA	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	3	3.16
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	5	3.16
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	9	3.15
(1,131)	1:159:K:GLU:N	1:159:K:GLU:CA	1:159:K:GLU:C	1:160:K:PRO:N	2	3.15
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	8	3.15
(1,1071)	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	8	3.14
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	10	3.14
(1,131)	1:159:K:GLU:N	1:159:K:GLU:CA	1:159:K:GLU:C	1:160:K:PRO:N	10	3.14
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	8	3.14
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	8	3.14
(1,824)	1:223:H:GLY:N	1:223:H:GLY:CA	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	3	3.13
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1	3.12
(1,103)	1:157:G:PRO:N	1:157:G:PRO:CA	1:157:G:PRO:C	1:158:G:LYS:N	1	3.12
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	4	3.12
(1,408)	1:184:L:TRP:N	1:184:L:TRP:CA	1:184:L:TRP:C	1:185:L:MET:N	7	3.11
(1,842)	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	9	3.1
(1,1083)	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	9	3.09
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1	3.08
(1,458)	1:188:H:THR:C	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	7	3.08
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	2	3.08
(1,98)	1:156:H:GLY:C	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	5	3.08
(1,651)	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	1	3.07
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	5	3.07
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	7	3.07
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	5	3.06
(1,829)	1:223:G:GLY:C	1:224:G:PRO:N	1:224:G:PRO:CA	1:224:G:PRO:C	6	3.06
(1,485)	1:190:K:LEU:C	1:191:K:VAL:N	1:191:K:VAL:CA	1:191:K:VAL:C	6	3.06
(1,1004)	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	7	3.05
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	2	3.05
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	6	3.05
(1,347)	1:179:K:GLN:N	1:179:K:GLN:CA	1:179:K:GLN:C	1:180:K:GLU:N	8	3.05
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	3	3.04
(1,553)	1:197:G:ASP:C	1:198:G:CYS:N	1:198:G:CYS:CA	1:198:G:CYS:C	9	3.03
(1,336)	1:178:L:SER:N	1:178:L:SER:CA	1:178:L:SER:C	1:179:L:GLN:N	4	3.03
(1,846)	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	1	3.0
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	8	3.0
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	5	3.0
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	3	3.0
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	3	2.99
(1,698)	1:211:H:LEU:C	1:212:H:GLU:N	1:212:H:GLU:CA	1:212:H:GLU:C	5	2.99
(1,678)	1:209:L:ALA:C	1:210:L:THR:N	1:210:L:THR:CA	1:210:L:THR:C	1	2.99
(1,254)	1:169:H:TYR:C	1:170:H:LYS:N	1:170:H:LYS:CA	1:170:H:LYS:C	8	2.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,168)	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	7	2.99
(1,846)	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	8	2.98
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	2	2.98
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	3	2.97
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	1	2.97
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	5	2.97
(1,933)	1:232:I:ALA:N	1:232:I:ALA:CA	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	6	2.96
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	1	2.96
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	9	2.94
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	6	2.94
(1,838)	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	5	2.94
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	7	2.94
(1,248)	1:169:H:TYR:N	1:169:H:TYR:CA	1:169:H:TYR:C	1:170:H:LYS:N	1	2.94
(1,15)	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	6	2.94
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	3	2.93
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	3	2.93
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	10	2.92
(1,740)	1:215:H:MET:N	1:215:H:MET:CA	1:215:H:MET:C	1:216:H:THR:N	10	2.92
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	3	2.92
(1,162)	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	8	2.92
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	2	2.92
(1,946)	1:233:J:GLU:N	1:233:J:GLU:CA	1:233:J:GLU:C	1:234:J:ALA:N	8	2.91
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	3	2.91
(1,730)	1:214:J:MET:N	1:214:J:MET:CA	1:214:J:MET:C	1:215:J:MET:N	10	2.91
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	9	2.91
(1,1055)	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	1:244:K:ILE:N	6	2.89
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	9	2.89
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	5	2.88
(1,425)	1:185:K:MET:C	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	9	2.88
(1,414)	1:184:L:TRP:C	1:185:L:MET:N	1:185:L:MET:CA	1:185:L:MET:C	4	2.87
(1,233)	1:167:K:ARG:C	1:168:K:PHE:N	1:168:K:PHE:CA	1:168:K:PHE:C	2	2.87
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	2	2.86
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	9	2.85
(1,167)	1:162:K:ARG:N	1:162:K:ARG:CA	1:162:K:ARG:C	1:163:K:ASP:N	5	2.85
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	1	2.85
(1,836)	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	10	2.84
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	10	2.84
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	8	2.83
(1,465)	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	3	2.83
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	7	2.81
(1,989)	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	1:237:K:GLN:CA	1:237:K:GLN:C	1	2.81
(1,848)	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	7	2.81
(1,841)	1:224:G:PRO:C	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	5	2.81
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	5	2.81
(1,71)	1:153:K:ILE:N	1:153:K:ILE:CA	1:153:K:ILE:C	1:154:K:ARG:N	10	2.81
(1,992)	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	8	2.8
(1,628)	1:203:J:LYS:C	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	4	2.8
(1,987)	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	9	2.79
(1,848)	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	10	2.79
(1,557)	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	2	2.78
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	6	2.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,855)	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	1:226:I:HIS:CA	1:226:I:HIS:C	1	2.77
(1,362)	1:180:H:GLU:C	1:181:H:VAL:N	1:181:H:VAL:CA	1:181:H:VAL:C	1	2.77
(1,168)	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	9	2.77
(1,98)	1:156:H:GLY:C	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1	2.77
(1,1109)	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1	2.76
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	1	2.76
(1,987)	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	1	2.76
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	4	2.75
(1,347)	1:179:K:GLN:N	1:179:K:GLN:CA	1:179:K:GLN:C	1:180:K:GLU:N	6	2.75
(1,55)	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	1:152:G:ASP:N	10	2.75
(1,456)	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	1:189:L:LEU:N	8	2.74
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	5	2.73
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	3	2.72
(1,238)	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	6	2.72
(1,185)	1:163:K:ASP:C	1:164:K:TYR:N	1:164:K:TYR:CA	1:164:K:TYR:C	6	2.72
(1,103)	1:157:G:PRO:N	1:157:G:PRO:CA	1:157:G:PRO:C	1:158:G:LYS:N	2	2.72
(1,1088)	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	5	2.71
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	8	2.71
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	2	2.7
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	1	2.7
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	9	2.7
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	4	2.7
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	10	2.69
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1	2.69
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	1	2.69
(1,19)	1:146:G:SER:C	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	3	2.69
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	8	2.68
(1,458)	1:188:H:THR:C	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	3	2.68
(1,422)	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	7	2.68
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	5	2.67
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	3	2.67
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	7	2.66
(1,459)	1:188:I:THR:C	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	7	2.65
(1,12)	1:145:L:GLY:C	1:146:L:SER:N	1:146:L:SER:CA	1:146:L:SER:C	2	2.65
(1,853)	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	1:226:G:HIS:CA	1:226:G:HIS:C	6	2.64
(1,840)	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	10	2.64
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	10	2.64
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	7	2.63
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	2	2.63
(1,992)	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	3	2.62
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	6	2.61
(1,546)	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	1:197:L:ASP:CA	1:197:L:ASP:C	7	2.61
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	9	2.6
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	8	2.59
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	3	2.59
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	9	2.59
(1,301)	1:173:G:ARG:C	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	6	2.59
(1,1108)	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	6	2.58
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	6	2.58
(1,817)	1:222:G:GLY:N	1:222:G:GLY:CA	1:222:G:GLY:C	1:223:G:GLY:N	2	2.58
(1,306)	1:173:L:ARG:C	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	6	2.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,987)	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	2	2.57
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	9	2.56
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	1	2.56
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	5	2.56
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	9	2.56
(1,842)	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	5	2.55
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	7	2.55
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	2	2.54
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	4	2.54
(1,836)	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	2	2.53
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	3	2.53
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	10	2.53
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	8	2.52
(1,989)	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	1:237:K:GLN:CA	1:237:K:GLN:C	2	2.51
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	4	2.51
(1,240)	1:168:L:PHE:N	1:168:L:PHE:CA	1:168:L:PHE:C	1:169:L:TYR:N	5	2.5
(1,238)	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	5	2.5
(1,162)	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	5	2.5
(1,852)	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	8	2.49
(1,917)	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	1:231:K:LEU:CA	1:231:K:LEU:C	1	2.48
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	8	2.48
(1,347)	1:179:K:GLN:N	1:179:K:GLN:CA	1:179:K:GLN:C	1:180:K:GLU:N	3	2.48
(1,23)	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	3	2.48
(1,1109)	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	6	2.47
(1,167)	1:162:K:ARG:N	1:162:K:ARG:CA	1:162:K:ARG:C	1:163:K:ASP:N	6	2.47
(1,164)	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	6	2.46
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	6	2.46
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	7	2.45
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	1	2.45
(1,457)	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	1:189:G:LEU:CA	1:189:G:LEU:C	10	2.45
(1,1090)	1:176:J:GLN:N	1:176:J:GLN:CA	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	8	2.44
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	2	2.44
(1,170)	1:162:H:ARG:C	1:163:H:ASP:N	1:163:H:ASP:CA	1:163:H:ASP:C	8	2.44
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	3	2.44
(1,1106)	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	6	2.43
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	3	2.43
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	7	2.43
(1,55)	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	1:152:G:ASP:N	8	2.43
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	7	2.42
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	9	2.42
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	4	2.42
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	10	2.41
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	5	2.41
(1,1081)	1:175:G:GLU:C	1:176:G:GLN:N	1:176:G:GLN:CA	1:176:G:GLN:C	8	2.4
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	6	2.39
(1,167)	1:162:K:ARG:N	1:162:K:ARG:CA	1:162:K:ARG:C	1:163:K:ASP:N	4	2.38
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	4	2.37
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	6	2.37
(1,772)	1:217:J:ALA:C	1:218:J:CYS:N	1:218:J:CYS:CA	1:218:J:CYS:C	6	2.37
(1,657)	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	1:209:I:ALA:N	7	2.37
(1,159)	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	1:162:I:ARG:CA	1:162:I:ARG:C	4	2.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	1	2.37
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	7	2.34
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	1	2.34
(1,249)	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	1:170:I:LYS:N	4	2.34
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	3	2.33
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	5	2.33
(1,15)	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	1	2.33
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	8	2.32
(1,485)	1:190:K:LEU:C	1:191:K:VAL:N	1:191:K:VAL:CA	1:191:K:VAL:C	10	2.32
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	10	2.32
(1,224)	1:167:H:ARG:N	1:167:H:ARG:CA	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	4	2.32
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	5	2.3
(1,328)	1:177:J:ALA:C	1:178:J:SER:N	1:178:J:SER:CA	1:178:J:SER:C	5	2.3
(1,885)	1:228:I:ALA:N	1:228:I:ALA:CA	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	7	2.29
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	5	2.29
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	10	2.29
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	6	2.29
(1,1005)	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	2	2.28
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	8	2.28
(1,670)	1:209:J:ALA:N	1:209:J:ALA:CA	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	5	2.28
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	6	2.28
(1,807)	1:220:I:GLY:C	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	4	2.27
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	9	2.27
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	4	2.27
(1,1107)	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	2	2.26
(1,1078)	1:175:J:GLU:N	1:175:J:GLU:CA	1:175:J:GLU:C	1:176:J:GLN:N	4	2.26
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	5	2.26
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	7	2.26
(1,568)	1:198:J:CYS:C	1:199:J:LYS:N	1:199:J:LYS:CA	1:199:J:LYS:C	6	2.26
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	9	2.26
(1,653)	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	6	2.25
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	9	2.25
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	6	2.25
(1,789)	1:219:I:GLN:N	1:219:I:GLN:CA	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	8	2.24
(1,275)	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	1:172:K:LEU:N	5	2.24
(1,167)	1:162:K:ARG:N	1:162:K:ARG:CA	1:162:K:ARG:C	1:163:K:ASP:N	3	2.24
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	6	2.23
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	10	2.23
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	2	2.23
(1,562)	1:198:J:CYS:N	1:198:J:CYS:CA	1:198:J:CYS:C	1:199:J:LYS:N	6	2.22
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	6	2.22
(1,19)	1:146:G:SER:C	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	4	2.22
(1,847)	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	2	2.21
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	2	2.21
(1,773)	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	1:218:K:CYS:CA	1:218:K:CYS:C	8	2.21
(1,254)	1:169:H:TYR:C	1:170:H:LYS:N	1:170:H:LYS:CA	1:170:H:LYS:C	2	2.21
(1,21)	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	3	2.21
(1,822)	1:222:L:GLY:N	1:222:L:GLY:CA	1:222:L:GLY:C	1:223:L:GLY:N	5	2.2
(1,478)	1:190:J:LEU:N	1:190:J:LEU:CA	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	6	2.2
(1,276)	1:171:L:THR:N	1:171:L:THR:CA	1:171:L:THR:C	1:172:L:LEU:N	10	2.2
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	3	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	3	2.2
(1,465)	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	1:190:I:LEU:N	2	2.19
(1,276)	1:171:L:THR:N	1:171:L:THR:CA	1:171:L:THR:C	1:172:L:LEU:N	2	2.19
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	10	2.18
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	6	2.18
(1,622)	1:203:J:LYS:N	1:203:J:LYS:CA	1:203:J:LYS:C	1:204:J:ALA:N	1	2.18
(1,401)	1:183:K:ASN:C	1:184:K:TRP:N	1:184:K:TRP:CA	1:184:K:TRP:C	4	2.18
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	1	2.18
(1,836)	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	7	2.17
(1,806)	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	1:221:H:VAL:CA	1:221:H:VAL:C	1	2.17
(1,719)	1:213:K:GLU:N	1:213:K:GLU:CA	1:213:K:GLU:C	1:214:K:MET:N	3	2.17
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	3	2.17
(1,1)	1:144:G:GLY:C	1:145:G:GLY:N	1:145:G:GLY:CA	1:145:G:GLY:C	6	2.17
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	10	2.16
(1,942)	1:232:L:ALA:C	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	9	2.15
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	2	2.15
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	2	2.15
(1,852)	1:225:L:GLY:N	1:225:L:GLY:CA	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	7	2.14
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	7	2.14
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	8	2.14
(1,9)	1:145:I:GLY:C	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	9	2.14
(1,1082)	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	6	2.13
(1,933)	1:232:I:ALA:N	1:232:I:ALA:CA	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	4	2.13
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	1	2.13
(1,456)	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	1:189:L:LEU:N	3	2.13
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	7	2.13
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	7	2.12
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	6	2.12
(1,458)	1:188:H:THR:C	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	10	2.12
(1,362)	1:180:H:GLU:C	1:181:H:VAL:N	1:181:H:VAL:CA	1:181:H:VAL:C	6	2.12
(1,252)	1:169:L:TYR:N	1:169:L:TYR:CA	1:169:L:TYR:C	1:170:L:LYS:N	4	2.12
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	6	2.12
(1,271)	1:171:G:THR:N	1:171:G:THR:CA	1:171:G:THR:C	1:172:G:LEU:N	8	2.11
(1,240)	1:168:L:PHE:N	1:168:L:PHE:CA	1:168:L:PHE:C	1:169:L:TYR:N	1	2.11
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	5	2.1
(1,557)	1:197:K:ASP:C	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	6	2.09
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	7	2.09
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	8	2.08
(1,2)	1:144:H:GLY:C	1:145:H:GLY:N	1:145:H:GLY:CA	1:145:H:GLY:C	2	2.08
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	3	2.07
(1,651)	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	4	2.07
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	7	2.07
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	8	2.07
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	4	2.06
(1,942)	1:232:L:ALA:C	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	3	2.06
(1,773)	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	1:218:K:CYS:CA	1:218:K:CYS:C	5	2.06
(1,561)	1:198:I:CYS:N	1:198:I:CYS:CA	1:198:I:CYS:C	1:199:I:LYS:N	4	2.06
(1,1004)	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	4	2.05
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	2	2.05
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	2	2.05
(1,1060)	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	1:244:J:ILE:CA	1:244:J:ILE:C	3	2.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,655)	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	1:209:G:ALA:N	4	2.04
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	7	2.04
(1,985)	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	2	2.03
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	9	2.03
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	8	2.03
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	6	2.02
(1,302)	1:173:H:ARG:C	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	3	2.02
(1,163)	1:162:G:ARG:N	1:162:G:ARG:CA	1:162:G:ARG:C	1:163:G:ASP:N	10	2.02
(1,999)	1:237:I:GLN:C	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	4	2.01
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	4	2.01
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1	2.01
(1,996)	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	5	2.0
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	6	2.0
(1,848)	1:225:H:GLY:N	1:225:H:GLY:CA	1:225:H:GLY:C	1:226:H:HIS:N	4	1.99
(1,468)	1:189:L:LEU:N	1:189:L:LEU:CA	1:189:L:LEU:C	1:190:L:LEU:N	4	1.99
(1,362)	1:180:H:GLU:C	1:181:H:VAL:N	1:181:H:VAL:CA	1:181:H:VAL:C	9	1.99
(1,841)	1:224:G:PRO:C	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	7	1.98
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	3	1.98
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	6	1.98
(1,362)	1:180:H:GLU:C	1:181:H:VAL:N	1:181:H:VAL:CA	1:181:H:VAL:C	5	1.98
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	6	1.97
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	9	1.97
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	9	1.97
(1,1089)	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	8	1.96
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	6	1.96
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	10	1.96
(1,457)	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	1:189:G:LEU:CA	1:189:G:LEU:C	6	1.96
(1,238)	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	9	1.96
(1,649)	1:207:G:PRO:C	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	3	1.95
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	8	1.94
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	1	1.94
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	10	1.93
(1,995)	1:237:K:GLN:N	1:237:K:GLN:CA	1:237:K:GLN:C	1:238:K:VAL:N	3	1.92
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	1	1.92
(1,227)	1:167:K:ARG:N	1:167:K:ARG:CA	1:167:K:ARG:C	1:168:K:PHE:N	7	1.92
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	10	1.92
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	2	1.91
(1,856)	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	1	1.91
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	4	1.91
(1,908)	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	1:231:H:LEU:N	8	1.9
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	10	1.9
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	5	1.9
(1,945)	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	1:234:I:ALA:N	5	1.89
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	3	1.89
(1,1089)	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	2	1.88
(1,866)	1:226:H:HIS:C	1:227:H:LYS:N	1:227:H:LYS:CA	1:227:H:LYS:C	4	1.88
(1,659)	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1:209:K:ALA:N	5	1.88
(1,366)	1:180:L:GLU:C	1:181:L:VAL:N	1:181:L:VAL:CA	1:181:L:VAL:C	6	1.88
(1,130)	1:159:J:GLU:N	1:159:J:GLU:CA	1:159:J:GLU:C	1:160:J:PRO:N	5	1.87
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	1	1.87
(1,25)	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	1:148:G:THR:N	5	1.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,4)	1:144:J:GLY:C	1:145:J:GLY:N	1:145:J:GLY:CA	1:145:J:GLY:C	10	1.87
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	7	1.86
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	7	1.86
(1,492)	1:191:L:VAL:N	1:191:L:VAL:CA	1:191:L:VAL:C	1:192:L:GLN:N	4	1.86
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	2	1.86
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	8	1.86
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	4	1.86
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	6	1.86
(1,55)	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	1:152:G:ASP:N	1	1.86
(1,766)	1:217:J:ALA:N	1:217:J:ALA:CA	1:217:J:ALA:C	1:218:J:CYS:N	6	1.85
(1,734)	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	1:215:H:MET:CA	1:215:H:MET:C	4	1.85
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	10	1.85
(1,1105)	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	6	1.84
(1,655)	1:208:G:GLY:N	1:208:G:GLY:CA	1:208:G:GLY:C	1:209:G:ALA:N	6	1.84
(1,549)	1:197:I:ASP:N	1:197:I:ASP:CA	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	6	1.84
(1,357)	1:180:I:GLU:N	1:180:I:GLU:CA	1:180:I:GLU:C	1:181:I:VAL:N	2	1.84
(1,616)	1:202:J:LEU:C	1:203:J:LYS:N	1:203:J:LYS:CA	1:203:J:LYS:C	1	1.83
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	6	1.83
(1,679)	1:210:G:THR:N	1:210:G:THR:CA	1:210:G:THR:C	1:211:G:LEU:N	4	1.82
(1,672)	1:209:L:ALA:N	1:209:L:ALA:CA	1:209:L:ALA:C	1:210:L:THR:N	5	1.82
(1,163)	1:162:G:ARG:N	1:162:G:ARG:CA	1:162:G:ARG:C	1:163:G:ASP:N	1	1.82
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	4	1.81
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	3	1.81
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	2	1.8
(1,963)	1:234:I:ALA:C	1:235:I:MET:N	1:235:I:MET:CA	1:235:I:MET:C	8	1.8
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	9	1.8
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	5	1.8
(1,383)	1:182:K:LYS:N	1:182:K:LYS:CA	1:182:K:LYS:C	1:183:K:ASN:N	3	1.8
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	2	1.8
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	3	1.79
(1,668)	1:209:H:ALA:N	1:209:H:ALA:CA	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	4	1.79
(1,594)	1:200:L:THR:C	1:201:L:ILE:N	1:201:L:ILE:CA	1:201:L:ILE:C	8	1.79
(1,168)	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	3	1.79
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	4	1.78
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	7	1.78
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	8	1.77
(1,347)	1:179:K:GLN:N	1:179:K:GLN:CA	1:179:K:GLN:C	1:180:K:GLU:N	7	1.77
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	7	1.76
(1,408)	1:184:L:TRP:N	1:184:L:TRP:CA	1:184:L:TRP:C	1:185:L:MET:N	4	1.76
(1,1109)	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	9	1.75
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	6	1.75
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	10	1.75
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	2	1.74
(1,110)	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	7	1.74
(1,76)	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	1:154:J:ARG:CA	1:154:J:ARG:C	10	1.74
(1,1005)	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	4	1.73
(1,1003)	1:238:G:VAL:N	1:238:G:VAL:CA	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	6	1.73
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	2	1.73
(1,383)	1:182:K:LYS:N	1:182:K:LYS:CA	1:182:K:LYS:C	1:183:K:ASN:N	10	1.73
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1	1.73
(1,587)	1:200:K:THR:N	1:200:K:THR:CA	1:200:K:THR:C	1:201:K:ILE:N	3	1.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,440)	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	8	1.72
(1,440)	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	5	1.71
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	8	1.71
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	6	1.7
(1,635)	1:204:K:ALA:N	1:204:K:ALA:CA	1:204:K:ALA:C	1:205:K:LEU:N	7	1.7
(1,152)	1:161:H:PHE:N	1:161:H:PHE:CA	1:161:H:PHE:C	1:162:H:ARG:N	10	1.7
(1,55)	1:151:G:LEU:N	1:151:G:LEU:CA	1:151:G:LEU:C	1:152:G:ASP:N	2	1.7
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	8	1.69
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	5	1.69
(1,151)	1:161:G:PHE:N	1:161:G:PHE:CA	1:161:G:PHE:C	1:162:G:ARG:N	1	1.69
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	2	1.68
(1,588)	1:200:L:THR:N	1:200:L:THR:CA	1:200:L:THR:C	1:201:L:ILE:N	8	1.68
(1,24)	1:146:L:SER:C	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	9	1.68
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	7	1.67
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	9	1.67
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	1	1.67
(1,17)	1:146:K:SER:N	1:146:K:SER:CA	1:146:K:SER:C	1:147:K:PRO:N	6	1.67
(1,458)	1:188:H:THR:C	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	5	1.66
(1,83)	1:154:K:ARG:N	1:154:K:ARG:CA	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	4	1.66
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	10	1.66
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	5	1.65
(1,829)	1:223:G:GLY:C	1:224:G:PRO:N	1:224:G:PRO:CA	1:224:G:PRO:C	9	1.65
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	2	1.65
(1,281)	1:171:K:THR:C	1:172:K:LEU:N	1:172:K:LEU:CA	1:172:K:LEU:C	4	1.64
(1,21)	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1	1.64
(1,11)	1:145:K:GLY:C	1:146:K:SER:N	1:146:K:SER:CA	1:146:K:SER:C	9	1.64
(1,945)	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	1:234:I:ALA:N	4	1.63
(1,517)	1:194:G:ALA:C	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1	1.62
(1,464)	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	4	1.62
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	7	1.61
(1,143)	1:160:K:PRO:N	1:160:K:PRO:CA	1:160:K:PRO:C	1:161:K:PHE:N	3	1.61
(1,80)	1:154:H:ARG:N	1:154:H:ARG:CA	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	8	1.6
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	5	1.6
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	9	1.59
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	7	1.59
(1,860)	1:226:H:HIS:N	1:226:H:HIS:CA	1:226:H:HIS:C	1:227:H:LYS:N	4	1.59
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	1	1.59
(1,456)	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	1:189:L:LEU:N	10	1.59
(1,183)	1:163:I:ASP:C	1:164:I:TYR:N	1:164:I:TYR:CA	1:164:I:TYR:C	2	1.59
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	2	1.59
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	9	1.58
(1,799)	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	1:221:G:VAL:N	2	1.57
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	2	1.57
(1,646)	1:205:J:LEU:N	1:205:J:LEU:CA	1:205:J:LEU:C	1:206:J:GLY:N	4	1.57
(1,464)	1:189:H:LEU:N	1:189:H:LEU:CA	1:189:H:LEU:C	1:190:H:LEU:N	9	1.57
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	6	1.57
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	8	1.57
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	1	1.56
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	5	1.56
(1,318)	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	1:177:L:ALA:CA	1:177:L:ALA:C	5	1.56
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	6	1.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,768)	1:217:L:ALA:N	1:217:L:ALA:CA	1:217:L:ALA:C	1:218:L:CYS:N	9	1.55
(1,430)	1:186:J:THR:N	1:186:J:THR:CA	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	6	1.55
(1,25)	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	1:148:G:THR:N	4	1.55
(1,499)	1:192:G:GLN:N	1:192:G:GLN:CA	1:192:G:GLN:C	1:193:G:ASN:N	3	1.54
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	8	1.54
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	3	1.54
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	6	1.53
(1,991)	1:237:G:GLN:N	1:237:G:GLN:CA	1:237:G:GLN:C	1:238:G:VAL:N	2	1.52
(1,834)	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	2	1.52
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	9	1.52
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	4	1.52
(1,485)	1:190:K:LEU:C	1:191:K:VAL:N	1:191:K:VAL:CA	1:191:K:VAL:C	2	1.51
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	5	1.51
(1,429)	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	4	1.51
(1,251)	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	1:170:K:LYS:N	9	1.51
(1,1008)	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	6	1.5
(1,224)	1:167:H:ARG:N	1:167:H:ARG:CA	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	6	1.5
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	7	1.49
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	10	1.49
(1,657)	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	1:209:I:ALA:N	8	1.49
(1,941)	1:232:K:ALA:C	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	10	1.48
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	1	1.48
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	3	1.47
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	10	1.47
(1,920)	1:231:H:LEU:N	1:231:H:LEU:CA	1:231:H:LEU:C	1:232:H:ALA:N	2	1.47
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	3	1.47
(1,821)	1:222:K:GLY:N	1:222:K:GLY:CA	1:222:K:GLY:C	1:223:K:GLY:N	1	1.47
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	6	1.47
(1,660)	1:208:L:GLY:N	1:208:L:GLY:CA	1:208:L:GLY:C	1:209:L:ALA:N	1	1.47
(1,622)	1:203:J:LYS:N	1:203:J:LYS:CA	1:203:J:LYS:C	1:204:J:ALA:N	2	1.47
(1,273)	1:171:I:THR:N	1:171:I:THR:CA	1:171:I:THR:C	1:172:I:LEU:N	7	1.47
(1,1089)	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	9	1.46
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	5	1.46
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	3	1.46
(1,587)	1:200:K:THR:N	1:200:K:THR:CA	1:200:K:THR:C	1:201:K:ILE:N	5	1.45
(1,552)	1:197:L:ASP:N	1:197:L:ASP:CA	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	8	1.45
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	5	1.45
(1,106)	1:157:J:PRO:N	1:157:J:PRO:CA	1:157:J:PRO:C	1:158:J:LYS:N	8	1.45
(1,1092)	1:176:L:GLN:N	1:176:L:GLN:CA	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	1	1.44
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	1	1.44
(1,1092)	1:176:L:GLN:N	1:176:L:GLN:CA	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	9	1.43
(1,912)	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	1:231:L:LEU:N	7	1.43
(1,799)	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	1:221:G:VAL:N	4	1.43
(1,455)	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	3	1.43
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	8	1.43
(1,247)	1:169:G:TYR:N	1:169:G:TYR:CA	1:169:G:TYR:C	1:170:G:LYS:N	5	1.43
(1,668)	1:209:H:ALA:N	1:209:H:ALA:CA	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	9	1.42
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	5	1.42
(1,1060)	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	1:244:J:ILE:CA	1:244:J:ILE:C	9	1.41
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	3	1.41
(1,765)	1:217:I:ALA:N	1:217:I:ALA:CA	1:217:I:ALA:C	1:218:I:CYS:N	4	1.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	3	1.41
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	3	1.41
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	9	1.4
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	3	1.4
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	3	1.4
(1,910)	1:230:J:VAL:N	1:230:J:VAL:CA	1:230:J:VAL:C	1:231:J:LEU:N	2	1.39
(1,671)	1:209:K:ALA:N	1:209:K:ALA:CA	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	7	1.39
(1,644)	1:205:H:LEU:N	1:205:H:LEU:CA	1:205:H:LEU:C	1:206:H:GLY:N	4	1.39
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	10	1.39
(1,977)	1:235:K:MET:C	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	4	1.38
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	9	1.38
(1,1001)	1:237:K:GLN:C	1:238:K:VAL:N	1:238:K:VAL:CA	1:238:K:VAL:C	7	1.37
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	8	1.37
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	1	1.37
(1,386)	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	1:183:H:ASN:CA	1:183:H:ASN:C	7	1.37
(1,168)	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	10	1.37
(1,103)	1:157:G:PRO:N	1:157:G:PRO:CA	1:157:G:PRO:C	1:158:G:LYS:N	5	1.37
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	8	1.37
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	3	1.37
(1,8)	1:145:H:GLY:C	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	8	1.37
(1,1088)	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	8	1.36
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	10	1.36
(1,824)	1:223:H:GLY:N	1:223:H:GLY:CA	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	2	1.35
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	1	1.35
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	9	1.35
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	10	1.35
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	3	1.35
(1,244)	1:168:J:PHE:C	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	6	1.35
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	4	1.35
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	8	1.34
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1	1.34
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	6	1.34
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	5	1.33
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	6	1.32
(1,847)	1:225:G:GLY:N	1:225:G:GLY:CA	1:225:G:GLY:C	1:226:G:HIS:N	10	1.32
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	3	1.32
(1,1076)	1:175:H:GLU:N	1:175:H:GLU:CA	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	2	1.31
(1,1076)	1:175:H:GLU:N	1:175:H:GLU:CA	1:175:H:GLU:C	1:176:H:GLN:N	10	1.31
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	7	1.31
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	4	1.3
(1,258)	1:169:L:TYR:C	1:170:L:LYS:N	1:170:L:LYS:CA	1:170:L:LYS:C	3	1.3
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	9	1.3
(1,1060)	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	1:244:J:ILE:CA	1:244:J:ILE:C	4	1.29
(1,836)	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	1:225:H:GLY:N	3	1.29
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	1	1.29
(1,656)	1:208:H:GLY:N	1:208:H:GLY:CA	1:208:H:GLY:C	1:209:H:ALA:N	4	1.29
(1,653)	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	1:208:K:GLY:CA	1:208:K:GLY:C	1	1.29
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	8	1.28
(1,457)	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	1:189:G:LEU:CA	1:189:G:LEU:C	1	1.28
(1,302)	1:173:H:ARG:C	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	1	1.28
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	2	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,141)	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1:161:I:PHE:N	5	1.28
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	5	1.27
(1,789)	1:219:I:GLN:N	1:219:I:GLN:CA	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	10	1.27
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	2	1.27
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	8	1.26
(1,251)	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	1:170:K:LYS:N	6	1.26
(1,158)	1:161:H:PHE:C	1:162:H:ARG:N	1:162:H:ARG:CA	1:162:H:ARG:C	8	1.26
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	4	1.26
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	10	1.26
(1,898)	1:229:J:ARG:N	1:229:J:ARG:CA	1:229:J:ARG:C	1:230:J:VAL:N	9	1.25
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	6	1.25
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	3	1.25
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	9	1.24
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	8	1.24
(1,258)	1:169:L:TYR:C	1:170:L:LYS:N	1:170:L:LYS:CA	1:170:L:LYS:C	5	1.24
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	4	1.24
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	10	1.24
(1,144)	1:160:L:PRO:N	1:160:L:PRO:CA	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	8	1.22
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	4	1.21
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	7	1.2
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	3	1.2
(1,497)	1:191:K:VAL:C	1:192:K:GLN:N	1:192:K:GLN:CA	1:192:K:GLN:C	1	1.19
(1,459)	1:188:I:THR:C	1:189:I:LEU:N	1:189:I:LEU:CA	1:189:I:LEU:C	5	1.19
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	2	1.19
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	8	1.18
(1,783)	1:218:I:CYS:C	1:219:I:GLN:N	1:219:I:GLN:CA	1:219:I:GLN:C	6	1.18
(1,929)	1:231:K:LEU:C	1:232:K:ALA:N	1:232:K:ALA:CA	1:232:K:ALA:C	9	1.17
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	7	1.17
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	8	1.17
(1,1083)	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	3	1.16
(1,816)	1:221:L:VAL:N	1:221:L:VAL:CA	1:221:L:VAL:C	1:222:L:GLY:N	2	1.16
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	7	1.16
(1,19)	1:146:G:SER:C	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	7	1.16
(1,1069)	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	1:175:G:GLU:CA	1:175:G:GLU:C	8	1.15
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	8	1.15
(1,588)	1:200:L:THR:N	1:200:L:THR:CA	1:200:L:THR:C	1:201:L:ILE:N	7	1.15
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	9	1.15
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	5	1.15
(1,154)	1:161:J:PHE:N	1:161:J:PHE:CA	1:161:J:PHE:C	1:162:J:ARG:N	9	1.15
(1,1083)	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	1:176:I:GLN:CA	1:176:I:GLN:C	2	1.14
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	3	1.14
(1,838)	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	3	1.14
(1,428)	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	8	1.14
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	4	1.14
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	3	1.13
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	9	1.13
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	10	1.12
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	6	1.11
(1,502)	1:192:J:GLN:N	1:192:J:GLN:CA	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	9	1.11
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	10	1.11
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	10	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,840)	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	2	1.1
(1,203)	1:165:K:VAL:N	1:165:K:VAL:CA	1:165:K:VAL:C	1:166:K:ASP:N	4	1.1
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	9	1.1
(1,786)	1:218:L:CYS:C	1:219:L:GLN:N	1:219:L:GLN:CA	1:219:L:GLN:C	5	1.09
(1,767)	1:217:K:ALA:N	1:217:K:ALA:CA	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	4	1.09
(1,660)	1:208:L:GLY:N	1:208:L:GLY:CA	1:208:L:GLY:C	1:209:L:ALA:N	5	1.09
(1,657)	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	1:209:I:ALA:N	2	1.09
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	10	1.09
(1,466)	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	3	1.09
(1,431)	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1	1.09
(1,98)	1:156:H:GLY:C	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	8	1.08
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	7	1.08
(1,1088)	1:176:H:GLN:N	1:176:H:GLN:CA	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	2	1.07
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	4	1.07
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	2	1.07
(1,15)	1:146:I:SER:N	1:146:I:SER:CA	1:146:I:SER:C	1:147:I:PRO:N	9	1.07
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	7	1.06
(1,799)	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	1:221:G:VAL:N	1	1.06
(1,242)	1:168:H:PHE:C	1:169:H:TYR:N	1:169:H:TYR:CA	1:169:H:TYR:C	5	1.06
(1,7)	1:145:G:GLY:C	1:146:G:SER:N	1:146:G:SER:CA	1:146:G:SER:C	5	1.06
(1,942)	1:232:L:ALA:C	1:233:L:GLU:N	1:233:L:GLU:CA	1:233:L:GLU:C	10	1.05
(1,872)	1:227:H:LYS:N	1:227:H:LYS:CA	1:227:H:LYS:C	1:228:H:ALA:N	1	1.05
(1,656)	1:208:H:GLY:N	1:208:H:GLY:CA	1:208:H:GLY:C	1:209:H:ALA:N	9	1.05
(1,142)	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	1:161:J:PHE:N	7	1.05
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	10	1.05
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	2	1.04
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	3	1.04
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	10	1.03
(1,1091)	1:176:K:GLN:N	1:176:K:GLN:CA	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1	1.03
(1,954)	1:233:L:GLU:C	1:234:L:ALA:N	1:234:L:ALA:CA	1:234:L:ALA:C	2	1.03
(1,554)	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	10	1.03
(1,135)	1:159:I:GLU:C	1:160:I:PRO:N	1:160:I:PRO:CA	1:160:I:PRO:C	1	1.03
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	3	1.02
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	1	1.02
(1,552)	1:197:L:ASP:N	1:197:L:ASP:CA	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	3	1.02
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	6	1.02
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	10	1.02
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	9	1.01
(1,1004)	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	5	1.01
(1,850)	1:225:J:GLY:N	1:225:J:GLY:CA	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	5	1.01
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	7	1.01
(1,103)	1:157:G:PRO:N	1:157:G:PRO:CA	1:157:G:PRO:C	1:158:G:LYS:N	4	1.01
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	2	1.01
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	9	1.0
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	2	1.0
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	10	1.0