Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 4, 2023 – 09:02 PM EDT

PDB ID	:	2LS8
BMRB ID	:	18415
Title	:	Solution structure of human C-type lectin domain family 4 member D
Authors	:	Harris, R.; Gaudette, J.; Bandaranayake, A.D.; Banu, R.; Bonanno, J.B.; Calarese, D.A.; Celikgil, A.; Chamala, S.; Chan, M.K.; Chaparro, R.; Evans, B.; Garforth, S.; Gizzi, A.; Hillerich, B.; Kar, A.; Lafleur, J.; Lim, S.; Love, J.; Matikainen, B.; Patel, H.; Seidel, R.D.; Smith, B.; Stead, M.; Girvin, M.E.; Almo, S.C.; New York Structural Genomics Research Consortium (NYSGRC)
Deposited on	:	2012-04-23

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

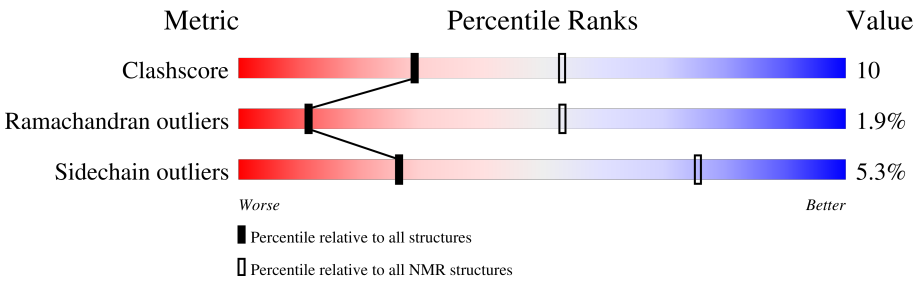
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.33

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 91%.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	156	62% 21% 8% 9%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 18 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:3-A:89, A:100-A:130 (118)	0.91	18
2	A:131-A:142 (12)	0.61	9

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	2, 3, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 17, 19
2	1, 4, 5, 9, 15, 18, 20

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2273 atoms, of which 1096 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called C-type lectin domain family 4 member D.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	142	2273	744	1096	207	217	9	0

There are 24 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	2	VAL	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	135	ALA	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	136	GLU	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	137	ASN	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	138	LEU	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	139	TYR	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	140	PHE	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	141	GLN	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	142	SER	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	143	HIS	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	144	HIS	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	145	HIS	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	146	HIS	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	147	HIS	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	148	HIS	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	149	TRP	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	150	SER	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	151	HIS	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	152	PRO	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	153	GLN	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	154	PHE	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	155	GLU	-	expression tag	UNP Q8WXI8
A	156	LYS	-	expression tag	UNP Q8WXI8

4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 62% 21% 8% 9%

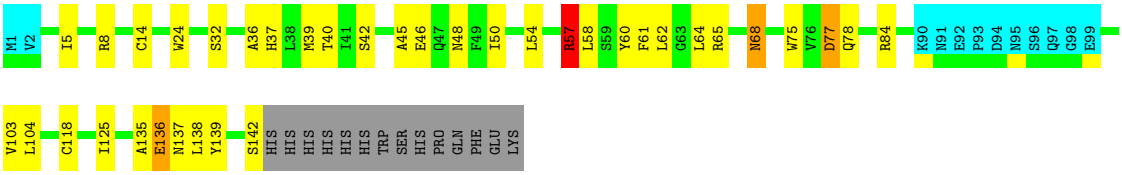
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

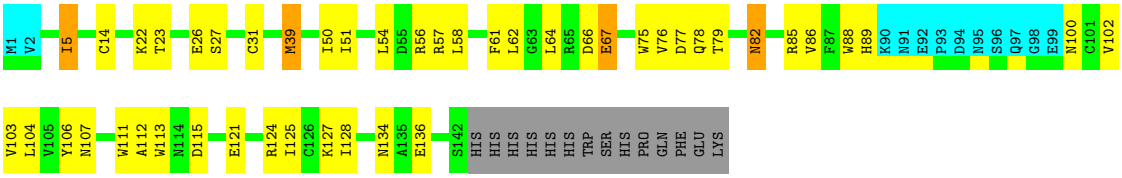
Chain A: 60% 21% • • 8% 9%



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

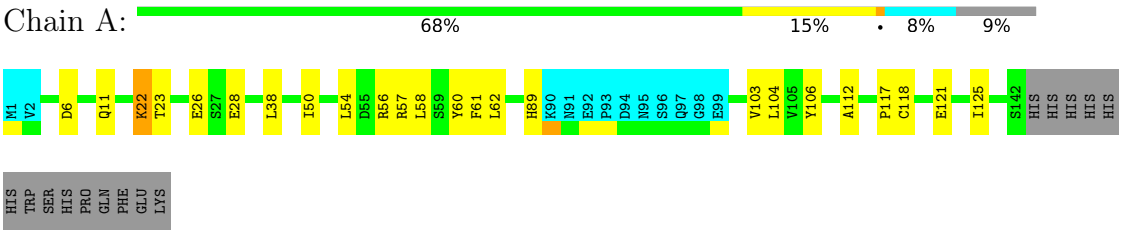
Chain A: 54% 27% • 8% 9%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

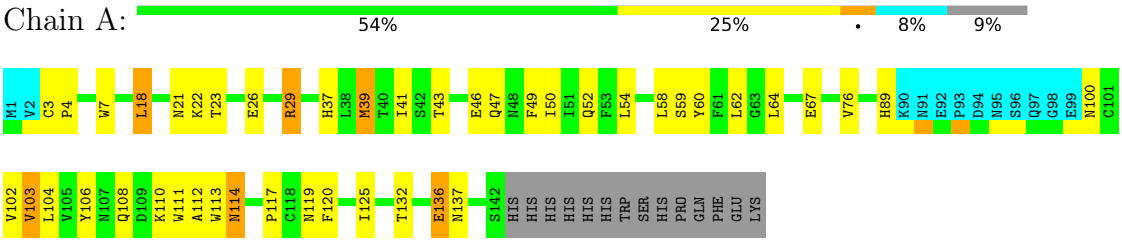
Chain A:



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

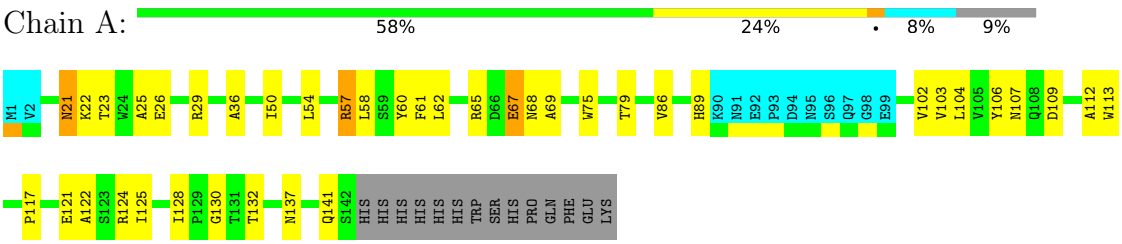
Chain A:



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A:



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 56% 27% 8% 9%

M1 V2 C3 D6 W7 F10 Q11 C14 Y15 A25 R29 S32 A36 M39 T40 I41 S42 T43 E46 I50 L54 R57 L58 S59 Y60 F61 L64 R65 D66 Q72 W75 F81 N82 P83 H89 K90 N91 E92 P93 D94 N95 S96 Q97

G98 E99 N100 C101 V102 V103 N107 A112 C118 I125 C126 K127 I128 P129 G130 A135 E136 N137 L138 S142 HIS HIS HIS HIS HIS TRP SER HIS PRO GLN PHE GLU LYS

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 60% 22% • 8% 9%

M1 V2 C3 P4 I5 D6 W7 Q11 C14 Y15 K22 T23 E26 S27 E28 S32 A36 H37 F49 I50 I51 Q52 F53 L54 D55 R56 R57 L58 R65 D66 E67 N68 Q78 P83 R84 H89 K90 N91 E92 P93 D94 N95 S96 Q97 G98 E99 N100 C101 V102

Y106 K110 W111 A112 W113 N114 D115 K127 I128 T131 S142 HIS HIS HIS HIS HIS TRP SER HIS PRO GLN PHE GLU LYS

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 54% 27% • 8% 9%

M1 V2 C3 P4 W7 R8 C14 Y15 N21 K22 A25 R29 N30 C31 S32 G33 M34 G35 A36 M39 T40 I41 I50 L54 D55 R56 R57 Y60 F61 L64 R65 D66 K70 W73 R74 W75 V76 D77 Q78 F81 N82 R85 H89 K90 N91

E92 P93 D94 N95 S96 Q97 G98 E99 V103 N107 A112 W113 N119 F120 E121 I125 C126 K127 G130 T131 T132 E136 N137 Q141 S142 HIS HIS HIS HIS HIS HIS TRP SER HIS PRO GLN PHE GLU LYS

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 58% 22% • 8% 9%

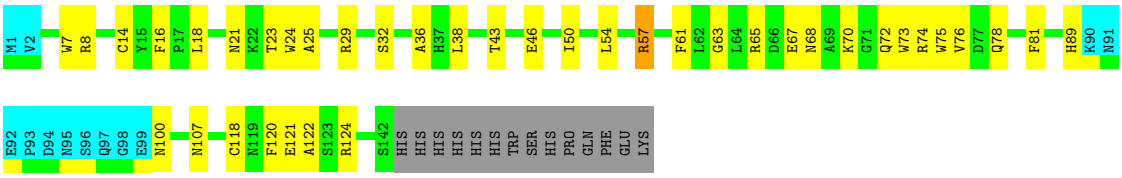
M1 V2 S12 L18 N21 K22 T23 E28 A36 M39 T40 I51 R56 R57 L58 S59 Y60 F61 L62 G63 L64 R65 D66 E67 K70 R74 W75 V76 D77 Q78 R85 H89 K90 N91 E92 P93 D94 N95 S96 Q97 G98 E99 N100 C101 V102 V103 L104

D109 K110 W111 A112 D115 C118 R124 I125 I128 L133 E136 S142 HIS HIS HIS HIS HIS HIS TRP SER HIS PRO GLN PHE GLU LYS

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

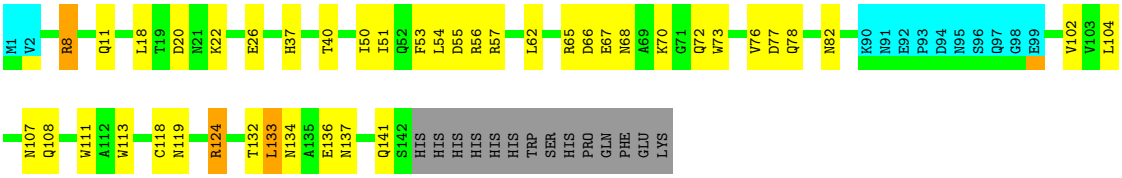
Chain A: 58% 24% • 8% 9%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

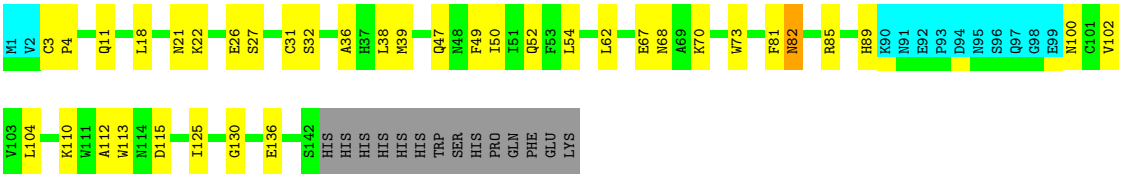
Chain A: 56% 25% • 8% 9%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

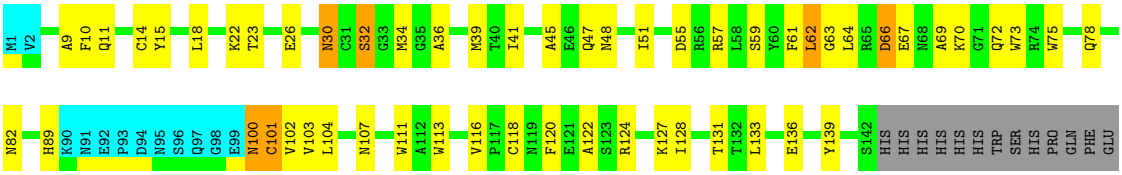
Chain A: 60% 23% • 8% 9%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 48% 31% • 8% 9%



LYS

4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 49% 31% • 8% 9%

M1 V2 C3 P4 I5 D6 W7 R8 C14 Y15 F16 P17 L18 K22 T23 W24 A25 E26 S27 E28 R29 S32 A36 M39 A45 E46 Q47 N48 F49 I50 I51 Q52 F53 L54 D55 R56 R57 L58 S59 Y60 F61 L62 E67 N68 A69 K70 G71 Q72 W73 R74 N82

V86 H89 K90 N91 E92 P93 D94 N95 S96 Q97 G98 E99 N100 V103 L104 V105 Y106 N107 Q108 D109 K110 W111 A112 W113 C118 R124 I125 I128 L133 Y139 S142 HIS HIS HIS HIS HIS TRP SER HIS PRO GLN PHE GLU LYS

4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 60% 22% • 8% 9%

M1 V2 S12 Y15 L18 T19 D20 E26 R29 A36 H37 I50 I51 L54 D55 R56 R57 L58 S59 Y60 L64 E67 N68 A69 K70 R74 W75 V76 D77 Q78 T79 R84 H89 K90 N91 E92 P93 D94 N95 S96 Q97 G98 E99 V102 N107

W111 R124 I125 C126 K127 I128 L133 N137 S142 HIS HIS HIS HIS HIS HIS TRP SER HIS PRO GLN PHE GLU LYS

4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 60% 22% • 8% 9%

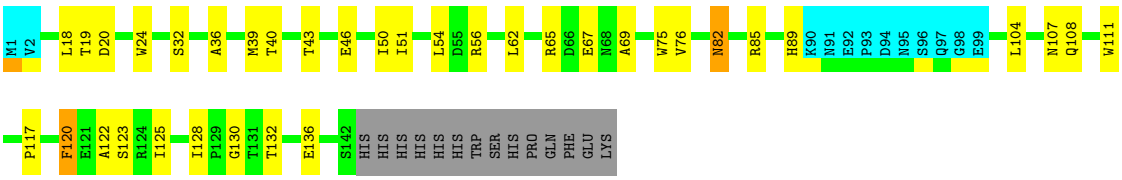
M1 V2 D6 Q11 T23 W24 N30 C31 S32 A36 H37 L38 M39 T40 Q47 I50 I51 L54 D55 R56 R57 L58 S59 Y60 F61 L62 G63 L64 N68 A69 W73 R74 W75 V76 D77 Q78 H89 K90 N91 E92 P93 D94 N95 S96 Q97 G98 E99 N100

V103 L104 K110 W111 A112 C118 I125 N134 S142 HIS HIS HIS HIS HIS HIS TRP SER HIS PRO GLN PHE GLU LYS

4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

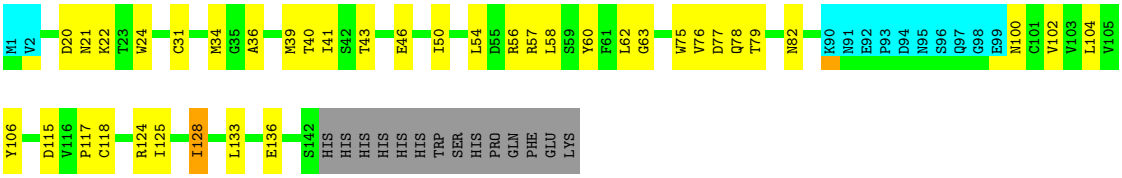
Chain A: 60% 22% • 8% 9%



4.2.18 Score per residue for model 18 (medoid)

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

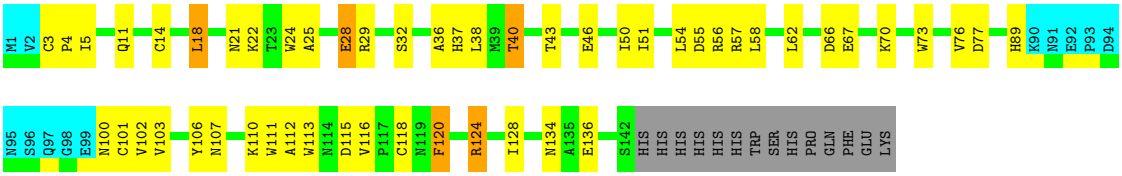
Chain A: 59% 24% • 8% 9%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

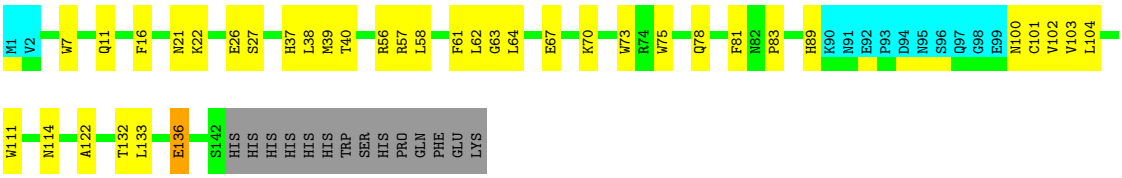
Chain A: 50% 30% • 8% 9%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: C-type lectin domain family 4 member D

Chain A: 60% 23% • 8% 9%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.21
CNS	refinement	1.21
ARIA	structure solution	2.3

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	1889
Number of shifts mapped to atoms	1766
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	123
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	91%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1085	1012	1010	22±5
All	All	21700	20240	20200	431

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 10.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LYS:HD3	1:A:26:GLU:HB3	0.85	1.48	3	2
1:A:67:GLU:HG2	1:A:70:LYS:HD2	0.79	1.51	9	1
1:A:39:MET:HB2	1:A:125:ILE:HB	0.77	1.54	1	8
1:A:45:ALA:HA	1:A:48:ASN:ND2	0.74	1.97	1	3
1:A:64:LEU:HB2	1:A:102:VAL:HG12	0.72	1.58	2	1
1:A:32:SER:HA	1:A:36:ALA:O	0.72	1.82	12	9
1:A:57:ARG:HG2	1:A:58:LEU:HD22	0.71	1.61	3	10
1:A:22:LYS:HB2	1:A:124:ARG:HD2	0.70	1.62	18	2
1:A:59:SER:HB3	1:A:103:VAL:HG11	0.70	1.63	4	1
1:A:133:LEU:HD13	1:A:133:LEU:H	0.69	1.45	11	1
1:A:51:ILE:HB	1:A:111:TRP:CD1	0.69	2.22	9	8
1:A:100:ASN:HB2	1:A:115:ASP:OD1	0.66	1.91	12	2
1:A:3:CYS:SG	1:A:4:PRO:HD2	0.66	2.30	19	1
1:A:37:HIS:CD2	1:A:77:ASP:HA	0.64	2.27	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LYS:HB2	1:A:124:ARG:HD3	0.64	1.70	2	1
1:A:102:VAL:HB	1:A:113:TRP:HB3	0.64	1.69	19	6
1:A:56:ARG:HA	1:A:111:TRP:CZ2	0.63	2.28	19	8
1:A:36:ALA:HB2	1:A:128:ILE:HG12	0.63	1.70	18	1
1:A:62:LEU:HD11	1:A:104:LEU:HG	0.62	1.69	20	5
1:A:21:ASN:HB3	1:A:121:GLU:HB3	0.62	1.69	8	2
1:A:22:LYS:HD2	1:A:26:GLU:HB3	0.62	1.70	20	3
1:A:59:SER:HB3	1:A:103:VAL:HG21	0.61	1.71	13	2
1:A:61:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG12	0.61	1.70	3	8
1:A:47:GLN:HE22	1:A:104:LEU:HD11	0.61	1.54	12	1
1:A:66:ASP:HB3	1:A:100:ASN:HB3	0.60	1.73	6	1
1:A:56:ARG:HG3	1:A:106:TYR:CD2	0.60	2.31	19	1
1:A:18:LEU:HB2	1:A:124:ARG:HG3	0.60	1.74	11	4
1:A:40:THR:HB	1:A:76:VAL:HG12	0.59	1.72	19	1
1:A:101:CYS:HB2	1:A:116:VAL:O	0.59	1.98	13	1
1:A:62:LEU:HD11	1:A:104:LEU:HB2	0.59	1.75	4	1
1:A:4:PRO:HB2	1:A:7:TRP:CD1	0.59	2.33	8	3
1:A:21:ASN:O	1:A:22:LYS:HD2	0.59	1.97	18	4
1:A:103:VAL:O	1:A:113:TRP:HA	0.58	1.98	4	2
1:A:67:GLU:O	1:A:70:LYS:HG3	0.58	1.98	20	4
1:A:36:ALA:HB2	1:A:128:ILE:HB	0.58	1.76	17	4
1:A:47:GLN:HE22	1:A:51:ILE:HD13	0.58	1.59	16	1
1:A:133:LEU:H	1:A:133:LEU:HD23	0.58	1.58	20	1
1:A:73:TRP:CH2	1:A:100:ASN:HB3	0.58	2.33	13	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:104:LEU:HG	0.57	1.75	1	5
1:A:62:LEU:HB2	1:A:102:VAL:HG13	0.57	1.76	9	2
1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HG2	0.57	1.60	8	1
1:A:66:ASP:HB2	1:A:101:CYS:HA	0.57	1.76	19	1
1:A:89:HIS:CE1	1:A:107:ASN:HB3	0.56	2.35	2	7
1:A:139:TYR:HA	1:A:142:SER:OG	0.56	2.00	1	2
1:A:67:GLU:H	1:A:67:GLU:CD	0.56	2.04	2	1
1:A:8:ARG:HD3	1:A:53:PHE:CE1	0.56	2.35	11	1
1:A:23:THR:HG23	1:A:121:GLU:OE2	0.56	2.01	5	2
1:A:100:ASN:HB2	1:A:115:ASP:OD2	0.56	2.01	19	1
1:A:136:GLU:CD	1:A:137:ASN:H	0.56	2.04	8	3
1:A:24:TRP:CH2	1:A:65:ARG:HG3	0.56	2.36	17	1
1:A:60:TYR:HB3	1:A:125:ILE:HG13	0.55	1.78	5	10
1:A:14:CYS:HB2	1:A:128:ILE:HB	0.55	1.79	19	2
1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	0.55	1.62	8	1
1:A:132:THR:O	1:A:136:GLU:HG2	0.55	2.02	11	1
1:A:84:ARG:NE	1:A:84:ARG:HA	0.55	2.16	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:PHE:O	1:A:52:GLN:HG2	0.55	2.02	7	4
1:A:64:LEU:HB2	1:A:102:VAL:HG22	0.54	1.78	4	1
1:A:37:HIS:CD2	1:A:77:ASP:HB2	0.54	2.37	19	1
1:A:75:TRP:HB2	1:A:79:THR:HB	0.54	1.80	2	4
1:A:89:HIS:CE1	1:A:107:ASN:HB2	0.54	2.38	14	2
1:A:62:LEU:CD2	1:A:104:LEU:HG	0.54	2.32	13	1
1:A:66:ASP:HA	1:A:70:LYS:HE2	0.54	1.79	8	1
1:A:63:GLY:O	1:A:75:TRP:HA	0.54	2.01	18	4
1:A:114:ASN:C	1:A:114:ASN:HD22	0.54	2.07	4	1
1:A:24:TRP:HB3	1:A:118:CYS:HB3	0.54	1.80	16	2
1:A:73:TRP:O	1:A:81:PHE:HB2	0.53	2.03	20	2
1:A:24:TRP:CH2	1:A:65:ARG:HB2	0.53	2.39	10	2
1:A:82:ASN:ND2	1:A:85:ARG:HB2	0.53	2.18	2	1
1:A:25:ALA:O	1:A:29:ARG:HG2	0.53	2.03	8	3
1:A:66:ASP:HB3	1:A:100:ASN:HB2	0.53	1.79	13	1
1:A:23:THR:HA	1:A:120:PHE:O	0.53	2.04	13	3
1:A:89:HIS:CE1	1:A:112:ALA:HB3	0.52	2.39	2	5
1:A:37:HIS:HB3	1:A:76:VAL:HG13	0.52	1.80	16	1
1:A:89:HIS:CD2	1:A:112:ALA:HB3	0.52	2.40	12	5
1:A:73:TRP:CH2	1:A:102:VAL:HG13	0.52	2.38	13	2
1:A:22:LYS:HE2	1:A:26:GLU:HB3	0.52	1.82	5	2
1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HE	0.52	1.65	15	1
1:A:47:GLN:HE21	1:A:104:LEU:HD21	0.51	1.64	13	1
1:A:55:ASP:OD1	1:A:57:ARG:HB3	0.51	2.06	11	3
1:A:23:THR:HB	1:A:118:CYS:O	0.51	2.06	16	3
1:A:133:LEU:H	1:A:133:LEU:HD12	0.51	1.65	15	2
1:A:106:TYR:CE1	1:A:109:ASP:HA	0.51	2.40	5	1
1:A:22:LYS:HD3	1:A:26:GLU:CB	0.51	2.33	12	1
1:A:40:THR:HA	1:A:75:TRP:CE3	0.51	2.41	18	4
1:A:43:THR:O	1:A:46:GLU:HB3	0.51	2.05	6	6
1:A:74:ARG:HD3	1:A:78:GLN:HA	0.51	1.82	15	1
1:A:50:ILE:O	1:A:54:LEU:HG	0.50	2.05	1	17
1:A:124:ARG:HB2	1:A:124:ARG:HH11	0.50	1.65	19	1
1:A:64:LEU:HB2	1:A:102:VAL:CG1	0.50	2.36	9	1
1:A:85:ARG:HD2	1:A:85:ARG:N	0.50	2.21	9	1
1:A:40:THR:HG21	1:A:77:ASP:HB3	0.50	1.83	18	1
1:A:89:HIS:HA	1:A:112:ALA:CB	0.50	2.37	8	3
1:A:74:ARG:NH2	1:A:78:GLN:HA	0.50	2.20	10	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:72:GLN:OE1	0.50	2.07	14	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:26:GLU:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:22:LYS:HA	1:A:121:GLU:OE1	0.50	2.06	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:PHE:HB3	1:A:15:TYR:CE1	0.50	2.42	6	2
1:A:66:ASP:HA	1:A:70:LYS:HD3	0.49	1.84	9	1
1:A:132:THR:HB	1:A:136:GLU:HG2	0.49	1.84	11	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:70:LYS:HZ3	0.49	1.67	10	1
1:A:39:MET:SD	1:A:125:ILE:HG21	0.49	2.48	12	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:18:LEU:N	0.49	2.22	19	3
1:A:9:ALA:HB1	1:A:133:LEU:HD21	0.49	1.83	13	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:102:VAL:HG22	0.49	1.83	6	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:124:ARG:NH2	0.48	2.23	13	1
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HD23	0.48	1.85	13	1
1:A:25:ALA:O	1:A:29:ARG:HG3	0.48	2.07	10	2
1:A:28:GLU:HG2	1:A:38:LEU:HD13	0.48	1.86	3	1
1:A:3:CYS:HB3	1:A:4:PRO:HD2	0.48	1.83	4	2
1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:CE1	0.47	2.43	14	5
1:A:20:ASP:OD2	1:A:22:LYS:HD3	0.47	2.09	18	1
1:A:108:GLN:O	1:A:110:LYS:HG2	0.47	2.10	4	1
1:A:31:CYS:HA	1:A:34:MET:SD	0.47	2.49	8	2
1:A:28:GLU:HG2	1:A:38:LEU:HB2	0.47	1.86	19	1
1:A:3:CYS:HB2	1:A:7:TRP:HB2	0.47	1.86	6	1
1:A:66:ASP:HB3	1:A:100:ASN:O	0.47	2.10	9	1
1:A:27:SER:HB3	1:A:124:ARG:HD3	0.47	1.87	14	1
1:A:89:HIS:NE2	1:A:107:ASN:HB3	0.47	2.25	19	1
1:A:40:THR:HG22	1:A:75:TRP:HB3	0.47	1.86	9	2
1:A:106:TYR:CZ	1:A:109:ASP:HA	0.47	2.45	5	1
1:A:8:ARG:CZ	1:A:8:ARG:HA	0.47	2.40	11	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:122:ALA:HB3	0.47	2.45	20	3
1:A:39:MET:CE	1:A:41:ILE:HD13	0.46	2.40	13	2
1:A:39:MET:HA	1:A:127:LYS:HB3	0.46	1.87	13	1
1:A:82:ASN:HB2	1:A:85:ARG:HB2	0.46	1.86	17	1
1:A:37:HIS:CD2	1:A:76:VAL:HG13	0.46	2.46	11	2
1:A:59:SER:HB3	1:A:103:VAL:CG1	0.46	2.38	4	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:124:ARG:NH2	0.46	2.25	14	1
1:A:67:GLU:CB	1:A:70:LYS:HD2	0.46	2.41	14	1
1:A:137:ASN:O	1:A:141:GLN:HG2	0.46	2.10	5	3
1:A:38:LEU:HB2	1:A:76:VAL:HG21	0.46	1.88	10	1
1:A:40:THR:HG21	1:A:77:ASP:OD1	0.46	2.11	11	1
1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:ASP:OD1	0.46	2.10	15	1
1:A:64:LEU:HB3	1:A:102:VAL:CG2	0.45	2.42	15	1
1:A:82:ASN:CB	1:A:85:ARG:HB2	0.45	2.42	8	3
1:A:14:CYS:HB2	1:A:128:ILE:HG23	0.45	1.88	13	1
1:A:41:ILE:HA	1:A:46:GLU:OE2	0.45	2.11	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:GLU:HB3	1:A:70:LYS:HD2	0.45	1.88	14	1
1:A:67:GLU:O	1:A:67:GLU:HG3	0.45	2.10	17	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:GLN:HB3	0.45	2.11	8	1
1:A:27:SER:HA	1:A:124:ARG:HD2	0.45	1.87	2	1
1:A:39:MET:CB	1:A:125:ILE:HB	0.45	2.40	6	1
1:A:24:TRP:CZ2	1:A:76:VAL:HG23	0.45	2.47	19	1
1:A:28:GLU:OE2	1:A:76:VAL:HG11	0.45	2.12	9	1
1:A:26:GLU:HG2	1:A:29:ARG:HH11	0.45	1.71	15	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:134:ASN:H	0.45	1.71	11	1
1:A:26:GLU:O	1:A:30:ASN:HB2	0.45	2.11	13	1
1:A:14:CYS:HB2	1:A:128:ILE:CG2	0.44	2.42	7	2
1:A:135:ALA:HB1	1:A:138:LEU:HB3	0.44	1.89	6	1
1:A:66:ASP:HA	1:A:73:TRP:HZ3	0.44	1.72	19	1
1:A:8:ARG:O	1:A:14:CYS:HA	0.44	2.13	14	4
1:A:40:THR:CG2	1:A:75:TRP:HB3	0.44	2.42	16	2
1:A:66:ASP:HB3	1:A:100:ASN:OD1	0.44	2.13	2	1
1:A:104:LEU:HG	1:A:111:TRP:CE3	0.44	2.48	17	1
1:A:89:HIS:HA	1:A:112:ALA:HB1	0.44	1.88	7	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:70:LYS:NZ	0.44	2.27	10	1
1:A:8:ARG:HD3	1:A:53:PHE:CD1	0.44	2.48	11	1
1:A:22:LYS:HB2	1:A:22:LYS:HZ3	0.44	1.72	7	1
1:A:64:LEU:HB2	1:A:102:VAL:HG11	0.44	1.88	9	1
1:A:40:THR:HA	1:A:75:TRP:HZ3	0.44	1.73	8	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:113:TRP:CE3	0.44	2.47	14	1
1:A:7:TRP:CD2	1:A:16:PHE:HB2	0.44	2.48	20	3
1:A:64:LEU:HB3	1:A:102:VAL:HG22	0.44	1.88	20	2
1:A:70:LYS:HE2	1:A:72:GLN:HB2	0.43	1.89	11	1
1:A:31:CYS:O	1:A:32:SER:HB2	0.43	2.13	8	2
1:A:132:THR:O	1:A:136:GLU:HB3	0.43	2.13	20	1
1:A:22:LYS:HA	1:A:121:GLU:OE2	0.43	2.12	3	1
1:A:39:MET:HA	1:A:127:LYS:HB2	0.43	1.90	6	1
1:A:63:GLY:CA	1:A:76:VAL:HG23	0.43	2.43	9	1
1:A:47:GLN:O	1:A:51:ILE:HG23	0.43	2.13	13	1
1:A:27:SER:CB	1:A:124:ARG:HD3	0.43	2.43	14	1
1:A:18:LEU:O	1:A:123:SER:HB3	0.43	2.12	17	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:102:VAL:HG12	0.43	1.89	18	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:104:LEU:N	0.43	2.28	18	1
1:A:64:LEU:HA	1:A:75:TRP:HA	0.43	1.91	6	1
1:A:26:GLU:HG2	1:A:29:ARG:NH1	0.43	2.29	14	1
1:A:22:LYS:HG3	1:A:26:GLU:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:124:ARG:CZ	0.43	2.44	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:LEU:HB3	1:A:76:VAL:HG21	0.43	1.91	19	1
1:A:74:ARG:HG2	1:A:75:TRP:N	0.43	2.29	9	1
1:A:21:ASN:O	1:A:22:LYS:HG2	0.43	2.14	12	1
1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HE1	0.43	1.73	19	1
1:A:28:GLU:OE1	1:A:28:GLU:HA	0.43	2.14	7	1
1:A:81:PHE:O	1:A:83:PRO:HD3	0.43	2.13	20	2
1:A:89:HIS:HA	1:A:112:ALA:HB3	0.43	1.90	8	2
1:A:86:VAL:HG13	1:A:88:TRP:CD1	0.42	2.49	2	1
1:A:75:TRP:O	1:A:77:ASP:N	0.42	2.53	2	2
1:A:59:SER:CB	1:A:103:VAL:HG21	0.42	2.44	13	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:73:TRP:HE3	0.42	1.74	16	1
1:A:66:ASP:HB2	1:A:101:CYS:CA	0.42	2.45	19	1
1:A:5:ILE:HD13	1:A:5:ILE:H	0.42	1.74	2	1
1:A:65:ARG:HG3	1:A:101:CYS:SG	0.42	2.54	7	1
1:A:63:GLY:HA2	1:A:76:VAL:HG23	0.42	1.91	9	1
1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:NE1	0.42	2.12	4	1
1:A:39:MET:SD	1:A:41:ILE:HD13	0.42	2.55	8	1
1:A:66:ASP:CB	1:A:100:ASN:HB2	0.42	2.43	13	1
1:A:36:ALA:HB2	1:A:128:ILE:CG1	0.42	2.44	14	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:75:TRP:CE2	0.42	2.50	1	1
1:A:73:TRP:HB2	1:A:81:PHE:HB2	0.42	1.92	10	2
1:A:24:TRP:HZ3	1:A:65:ARG:HE	0.42	1.57	10	1
1:A:40:THR:HG22	1:A:75:TRP:CE3	0.42	2.50	17	1
1:A:43:THR:OG1	1:A:46:GLU:HB2	0.42	2.15	18	1
1:A:24:TRP:HB3	1:A:118:CYS:SG	0.42	2.55	14	1
1:A:39:MET:HA	1:A:127:LYS:CB	0.42	2.45	6	1
1:A:15:TYR:CE2	1:A:127:LYS:HB3	0.42	2.50	7	1
1:A:124:ARG:HB2	1:A:124:ARG:NH1	0.42	2.30	19	1
1:A:65:ARG:HD3	1:A:67:GLU:OE1	0.41	2.15	5	1
1:A:27:SER:OG	1:A:38:LEU:HD13	0.41	2.14	12	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:104:LEU:HB2	0.41	1.91	17	1
1:A:60:TYR:N	1:A:103:VAL:HG22	0.41	2.30	4	1
1:A:21:ASN:HA	1:A:122:ALA:O	0.41	2.15	5	1
1:A:22:LYS:HA	1:A:22:LYS:NZ	0.41	2.30	12	1
1:A:67:GLU:O	1:A:68:ASN:HB2	0.41	2.16	14	1
1:A:120:PHE:CZ	1:A:122:ALA:HB2	0.41	2.51	17	1
1:A:32:SER:N	1:A:36:ALA:O	0.41	2.52	8	1
1:A:65:ARG:HG2	1:A:66:ASP:N	0.41	2.29	11	1
1:A:57:ARG:HG2	1:A:58:LEU:HD13	0.41	1.92	14	1
1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HB2	0.41	1.92	4	1
1:A:83:PRO:O	1:A:84:ARG:HD2	0.41	2.16	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:SER:HB3	1:A:38:LEU:HD21	0.41	1.93	20	1
1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:TRP:HB3	0.41	1.92	2	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:113:TRP:CZ3	0.41	2.51	5	1
1:A:113:TRP:N	1:A:113:TRP:CD1	0.41	2.87	8	1
1:A:57:ARG:HB3	1:A:58:LEU:HD22	0.41	1.91	9	1
1:A:107:ASN:O	1:A:108:GLN:HB2	0.41	2.16	11	1
1:A:70:LYS:HB2	1:A:72:GLN:HG2	0.41	1.91	13	1
1:A:4:PRO:HD2	1:A:7:TRP:CD1	0.41	2.50	14	1
1:A:15:TYR:CE2	1:A:127:LYS:HE3	0.41	2.51	15	1
1:A:55:ASP:OD2	1:A:57:ARG:HB3	0.41	2.15	19	1
1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:CZ	0.40	2.51	7	1
1:A:67:GLU:HG2	1:A:68:ASN:HD22	0.40	1.75	10	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:124:ARG:NH1	0.40	2.30	15	1
1:A:133:LEU:H	1:A:133:LEU:HD22	0.40	1.75	14	1
1:A:135:ALA:HA	1:A:138:LEU:HB3	0.40	1.92	1	1
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:HD12	0.40	2.32	9	1
1:A:113:TRP:CD1	1:A:113:TRP:N	0.40	2.88	14	1
1:A:5:ILE:H	1:A:5:ILE:HD12	0.40	1.75	7	1
1:A:23:THR:OG1	1:A:26:GLU:HG2	0.40	2.16	7	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	129/156 (83%)	114±3 (88±3%)	13±3 (10±2%)	2±1 (2±1%)	11	53
All	All	2580/3120 (83%)	2278 (88%)	253 (10%)	49 (2%)	11	53

All 19 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	11	GLN	9
1	A	76	VAL	4
1	A	69	ALA	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	5	ILE	3
1	A	57	ARG	3
1	A	78	GLN	3
1	A	39	MET	3
1	A	6	ASP	3
1	A	130	GLY	3
1	A	68	ASN	2
1	A	77	ASP	2
1	A	32	SER	2
1	A	100	ASN	2
1	A	41	ILE	1
1	A	67	GLU	1
1	A	21	ASN	1
1	A	131	THR	1
1	A	101	CYS	1
1	A	20	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	117/142 (82%)	111±3 (95±3%)	6±3 (5±3%)	26	75
All	All	2340/2840 (82%)	2215 (95%)	125 (5%)	26	75

All 54 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	136	GLU	12
1	A	82	ASN	8
1	A	78	GLN	7
1	A	67	GLU	6
1	A	68	ASN	5
1	A	124	ARG	5
1	A	57	ARG	4
1	A	110	LYS	4
1	A	84	ARG	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	134	ASN	3
1	A	22	LYS	3
1	A	47	GLN	3
1	A	119	ASN	3
1	A	72	GLN	3
1	A	37	HIS	3
1	A	42	SER	2
1	A	127	LYS	2
1	A	18	LEU	2
1	A	58	LEU	2
1	A	103	VAL	2
1	A	40	THR	2
1	A	115	ASP	2
1	A	39	MET	2
1	A	21	ASN	2
1	A	77	ASP	2
1	A	109	ASP	2
1	A	30	ASN	2
1	A	62	LEU	2
1	A	120	PHE	2
1	A	46	GLU	1
1	A	5	ILE	1
1	A	31	CYS	1
1	A	29	ARG	1
1	A	114	ASN	1
1	A	132	THR	1
1	A	23	THR	1
1	A	85	ARG	1
1	A	100	ASN	1
1	A	118	CYS	1
1	A	8	ARG	1
1	A	20	ASP	1
1	A	133	LEU	1
1	A	34	MET	1
1	A	66	ASP	1
1	A	139	TYR	1
1	A	48	ASN	1
1	A	59	SER	1
1	A	74	ARG	1
1	A	137	ASN	1
1	A	19	THR	1
1	A	128	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	28	GLU	1
1	A	116	VAL	1
1	A	101	CYS	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 91% for the well-defined parts and 90% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	1889
Number of shifts mapped to atoms	1766
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	123
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	14

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

- No matching atom found in the structure. All 123 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	143	HIS	H	8.018	0.003	1
1	A	143	HIS	HA	4.496	0.001	1
1	A	143	HIS	HB2	3.033	0.001	2
1	A	143	HIS	HB3	2.734	0.007	2
1	A	143	HIS	HD2	6.99	0.000	1
1	A	143	HIS	C	174.397	0.000	1
1	A	143	HIS	CA	56.043	0.025	1
1	A	143	HIS	CB	28.949	0.084	1
1	A	143	HIS	N	118.375	0.030	1
1	A	148	HIS	HA	4.636	0.006	1
1	A	148	HIS	HB2	3.034	0.003	1
1	A	148	HIS	HB3	3.034	0.003	1
1	A	148	HIS	C	174.268	0.005	1
1	A	148	HIS	CA	55.709	0.041	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	148	HIS	CB	29.358	0.006	1
1	A	149	TRP	H	8.141	0.001	1
1	A	149	TRP	HA	4.664	0.004	1
1	A	149	TRP	HB2	3.234	0.004	2
1	A	149	TRP	HB3	3.142	0.003	2
1	A	149	TRP	HD1	7.167	0.005	1
1	A	149	TRP	HE1	10.097	0.000	1
1	A	149	TRP	HE3	7.497	0.002	1
1	A	149	TRP	HZ2	7.32	0.006	1
1	A	149	TRP	HZ3	7.031	0.000	1
1	A	149	TRP	HH2	7.095	0.007	1
1	A	149	TRP	C	176.122	0.017	1
1	A	149	TRP	CA	57.129	0.024	1
1	A	149	TRP	CB	29.935	0.054	1
1	A	149	TRP	CD1	127.203	0.011	1
1	A	149	TRP	CE3	121.053	0.014	1
1	A	149	TRP	CZ2	114.65	0.001	1
1	A	149	TRP	CZ3	122.204	0.002	1
1	A	149	TRP	CH2	124.785	0.028	1
1	A	149	TRP	N	122.905	0.020	1
1	A	149	TRP	NE1	129.415	0.011	1
1	A	150	SER	H	8.231	0.001	1
1	A	150	SER	HA	4.331	0.004	1
1	A	150	SER	HB2	3.702	0.004	2
1	A	150	SER	HB3	3.662	0.000	2
1	A	150	SER	C	173.711	0.016	1
1	A	150	SER	CA	58.331	0.013	1
1	A	150	SER	CB	63.802	0.025	1
1	A	150	SER	N	117.58	0.056	1
1	A	151	HIS	H	8.167	0.002	1
1	A	151	HIS	HA	4.834	0.001	1
1	A	151	HIS	HB2	3.139	0.008	2
1	A	151	HIS	HB3	3.024	0.002	2
1	A	151	HIS	C	172.492	0.000	1
1	A	151	HIS	CA	53.656	0.006	1
1	A	151	HIS	CB	28.947	0.005	1
1	A	151	HIS	N	120.167	0.021	1
1	A	152	PRO	HA	4.313	0.003	1
1	A	152	PRO	HB2	1.765	0.002	2
1	A	152	PRO	HB3	2.2	0.003	2
1	A	152	PRO	HG2	1.945	0.003	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	152	PRO	HG3	1.946	0.003	1
1	A	152	PRO	HD2	3.688	0.002	2
1	A	152	PRO	HD3	3.497	0.002	2
1	A	152	PRO	C	176.941	0.001	1
1	A	152	PRO	CA	63.605	0.005	1
1	A	152	PRO	CB	32.251	0.007	1
1	A	152	PRO	CG	27.521	0.008	1
1	A	152	PRO	CD	50.786	0.010	1
1	A	153	GLN	H	8.475	0.001	1
1	A	153	GLN	HA	4.189	0.002	1
1	A	153	GLN	HB2	1.884	0.008	2
1	A	153	GLN	HB3	1.855	0.010	2
1	A	153	GLN	HG2	2.168	0.001	2
1	A	153	GLN	HG3	2.1	0.002	2
1	A	153	GLN	HE21	6.797	0.000	1
1	A	153	GLN	HE22	7.41	0.002	1
1	A	153	GLN	C	175.723	0.010	1
1	A	153	GLN	CA	56.305	0.012	1
1	A	153	GLN	CB	29.431	0.012	1
1	A	153	GLN	CG	33.683	0.000	1
1	A	153	GLN	N	120.519	0.028	1
1	A	153	GLN	NE2	112.157	0.009	1
1	A	154	PHE	H	8.113	0.003	1
1	A	154	PHE	HA	4.677	0.004	1
1	A	154	PHE	HB2	3.192	0.004	2
1	A	154	PHE	HB3	2.998	0.008	2
1	A	154	PHE	HD1	7.225	0.004	3
1	A	154	PHE	HD2	7.225	0.004	3
1	A	154	PHE	HE1	7.293	0.002	3
1	A	154	PHE	HE2	7.293	0.002	3
1	A	154	PHE	HZ	7.237	0.000	1
1	A	154	PHE	C	175.595	0.027	1
1	A	154	PHE	CA	57.368	0.013	1
1	A	154	PHE	CB	39.663	0.013	1
1	A	154	PHE	CD1	131.909	0.086	3
1	A	154	PHE	CD2	131.909	0.086	3
1	A	154	PHE	CE1	131.732	0.048	3
1	A	154	PHE	CE2	131.732	0.048	3
1	A	154	PHE	CZ	129.993	0.000	1
1	A	154	PHE	N	119.769	0.023	1
1	A	155	GLU	H	8.213	0.003	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	155	GLU	HA	4.272	0.006	1
1	A	155	GLU	HB2	2.036	0.000	2
1	A	155	GLU	HB3	1.885	0.004	2
1	A	155	GLU	HG2	2.233	0.008	1
1	A	155	GLU	HG3	2.233	0.008	1
1	A	155	GLU	C	175.213	0.012	1
1	A	155	GLU	CA	56.535	0.007	1
1	A	155	GLU	CB	30.531	0.172	1
1	A	155	GLU	CG	34.256	0.003	1
1	A	155	GLU	N	122.522	0.019	1
1	A	156	LYS	H	7.881	0.002	1
1	A	156	LYS	HA	4.128	0.008	1
1	A	156	LYS	HB2	1.826	0.004	2
1	A	156	LYS	HB3	1.722	0.003	2
1	A	156	LYS	HG2	1.406	0.011	1
1	A	156	LYS	HG3	1.406	0.011	1
1	A	156	LYS	HD2	1.684	0.000	1
1	A	156	LYS	HD3	1.684	0.000	1
1	A	156	LYS	HE2	2.997	0.001	1
1	A	156	LYS	HE3	2.997	0.001	1
1	A	156	LYS	C	181.221	0.000	1
1	A	156	LYS	CA	57.796	0.014	1
1	A	156	LYS	CB	33.884	0.015	1
1	A	156	LYS	CG	24.833	0.000	1
1	A	156	LYS	CD	29.245	0.000	1
1	A	156	LYS	CE	42.072	0.000	1
1	A	156	LYS	N	126.928	0.025	1

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	147	-0.01 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C_{\beta}$	141	-0.09 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C'$	142	0.07 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	131	0.36 ± 0.35	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 91%, i.e. 1655 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1822. 0 out of 15 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	617/643 (96%)	250/259 (97%)	251/260 (97%)	116/124 (94%)
Sidechain	828/953 (87%)	562/612 (92%)	240/291 (82%)	26/50 (52%)
Aromatic	210/226 (93%)	105/111 (95%)	98/104 (94%)	7/11 (64%)
Overall	1655/1822 (91%)	917/982 (93%)	589/655 (90%)	149/185 (81%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 90%, i.e. 1765 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1968. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	659/702 (94%)	267/283 (94%)	269/284 (95%)	123/135 (91%)
Sidechain	896/1040 (86%)	608/666 (91%)	259/320 (81%)	29/54 (54%)
Aromatic	210/226 (93%)	105/111 (95%)	98/104 (94%)	7/11 (64%)
Overall	1765/1968 (90%)	980/1060 (92%)	626/708 (88%)	159/200 (80%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

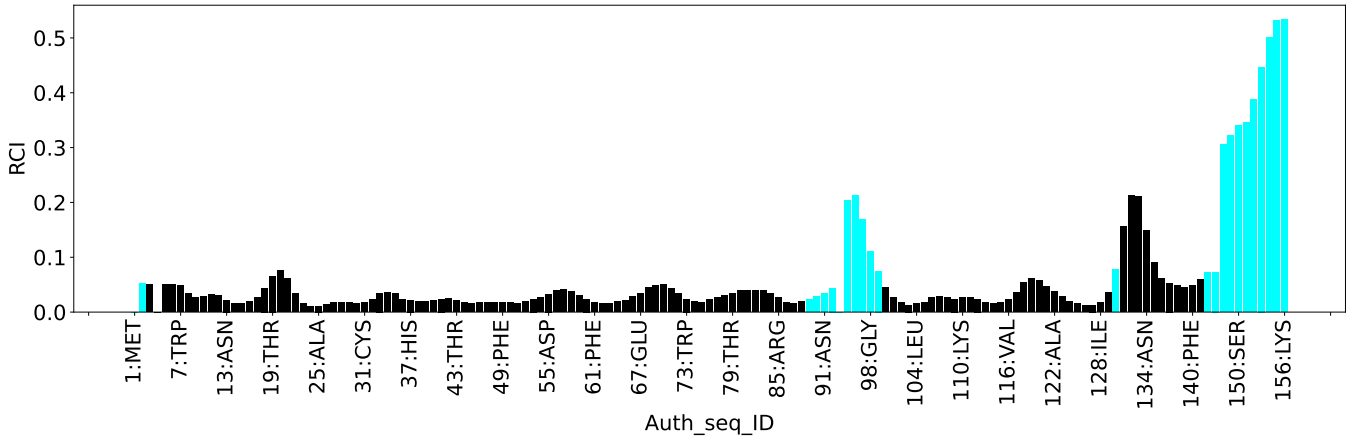
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	66	ASP	HB3	0.57	1.32 – 4.00	-7.8
1	A	106	TYR	HB2	0.30	1.09 – 4.72	-7.2
1	A	16	PHE	HB3	0.49	1.03 – 4.85	-6.4
1	A	113	TRP	HE3	4.97	5.27 – 9.37	-5.8
1	A	87	PHE	HB3	0.75	1.03 – 4.85	-5.7
1	A	47	GLN	HE21	4.84	5.02 – 9.43	-5.4
1	A	65	ARG	HD2	1.89	1.97 – 4.26	-5.3
1	A	11	GLN	HG3	0.84	0.91 – 3.68	-5.2
1	A	73	TRP	HB3	1.27	1.31 – 4.93	-5.1
1	A	64	LEU	HD21	-0.68	-0.65 – 2.13	-5.1
1	A	64	LEU	HD22	-0.68	-0.65 – 2.13	-5.1
1	A	64	LEU	HD23	-0.68	-0.65 – 2.13	-5.1
1	A	4	PRO	HG2	0.39	0.41 – 3.45	-5.0
1	A	65	ARG	HD3	1.80	1.81 – 4.39	-5.0

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis (i)

8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

Description	Value
Total distance restraints	2332
Intra-residue (|i-j|=0)	668
Sequential (|i-j|=1)	559
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	314
Long range (|i-j|≥5)	710
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	72
Disulfide bond restraints	9
Total dihedral-angle restraints	167
Number of unmapped restraints	1
Number of restraints per residue	16.0
Number of long range restraints per residue[1]	4.9

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

8.2 Residual restraint violations (i)

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

8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	12.3	0.2
0.2-0.5 (Medium)	8.1	0.5
>0.5 (Large)	44.9	4.18

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)	10.4	8.0
10.0-20.0 (Medium)	None	None
>20.0 (Large)	None	None

9 Distance violation analysis (i)

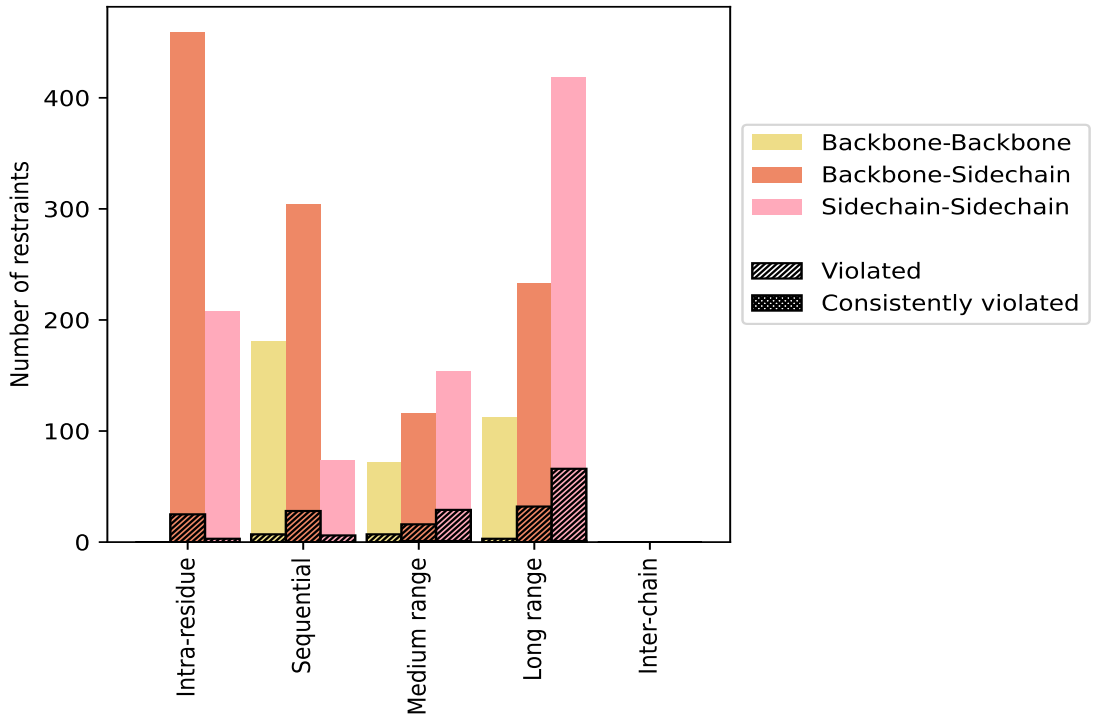
9.1 Summary of distance violations (i)

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

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	668	28.6	28	4.2	1.2	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	1	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	459	19.7	25	5.4	1.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	208	8.9	3	1.4	0.1	0	0.0	0.0
Sequential (|i-j|=1)	559	24.0	41	7.3	1.8	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	181	7.8	7	3.9	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	304	13.0	28	9.2	1.2	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	74	3.2	6	8.1	0.3	0	0.0	0.0
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	314	13.5	48	15.3	2.1	2	0.6	0.1
Backbone-Backbone	44	1.9	3	6.8	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	116	5.0	16	13.8	0.7	1	0.9	0.0
Sidechain-Sidechain	154	6.6	29	18.8	1.2	1	0.6	0.0
Long range (|i-j|≥5)	710	30.4	100	14.1	4.3	1	0.1	0.0
Backbone-Backbone	68	2.9	2	2.9	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	233	10.0	32	13.7	1.4	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	409	17.5	66	16.1	2.8	1	0.2	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	72	3.1	5	6.9	0.2	0	0.0	0.0
Disulfide bond	9	0.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	2332	100.0	222	9.5	9.5	3	0.1	0.1
Backbone-Backbone	366	15.7	17	4.6	0.7	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1112	47.7	101	9.1	4.3	1	0.1	0.0
Sidechain-Sidechain	854	36.6	104	12.2	4.5	2	0.2	0.1

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

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



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

9.2 Distance violation statistics for each model (i)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	4	6	22	38	0	70	1.25	4.16	1.03	1.02
2	5	9	21	48	0	83	1.4	4.12	1.0	1.26
3	5	10	20	50	0	85	1.37	3.92	1.07	1.24
4	5	5	16	30	0	56	1.04	4.07	1.03	0.52
5	5	5	17	33	0	60	1.52	4.04	1.15	1.36
6	5	3	19	40	0	67	1.25	4.18	0.96	1.21
7	5	4	19	34	0	62	1.31	3.93	1.05	1.14
8	7	3	20	35	0	65	1.32	3.92	1.12	1.04
9	5	5	17	21	0	48	1.15	4.13	0.9	1.01
10	5	6	17	45	0	73	1.46	4.14	1.07	1.33
11	4	4	18	36	0	62	1.34	3.87	1.03	1.25

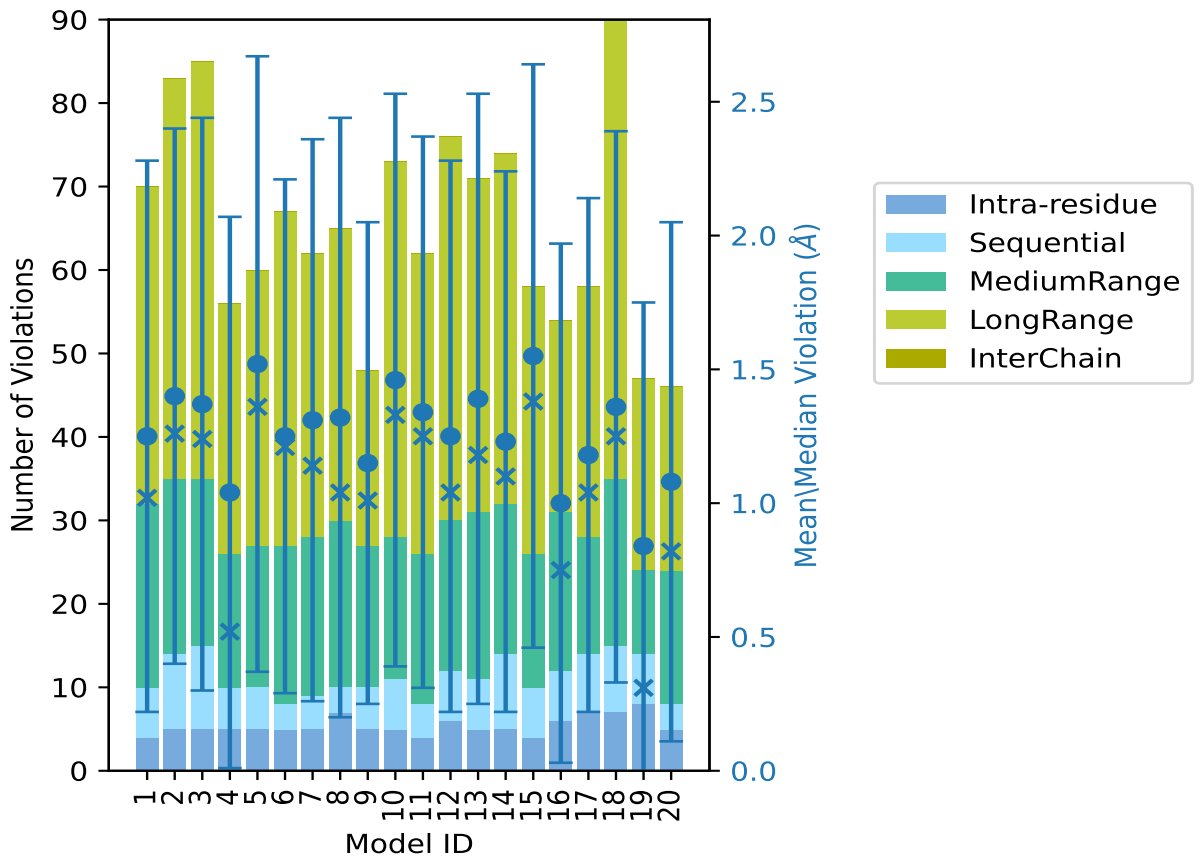
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
12	6	6	18	46	0	76	1.25	4.04	1.03	1.04
13	5	6	20	40	0	71	1.39	3.9	1.14	1.18
14	5	9	18	42	0	74	1.23	4.03	1.01	1.1
15	4	6	16	32	0	58	1.55	4.16	1.09	1.38
16	6	6	19	23	0	54	1.0	4.04	0.97	0.75
17	7	7	14	30	0	58	1.18	3.6	0.96	1.04
18	7	8	20	55	0	90	1.36	4.1	1.03	1.25
19	8	6	10	23	0	47	0.84	3.77	0.91	0.31
20	5	3	16	22	0	46	1.08	3.9	0.97	0.82

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

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



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

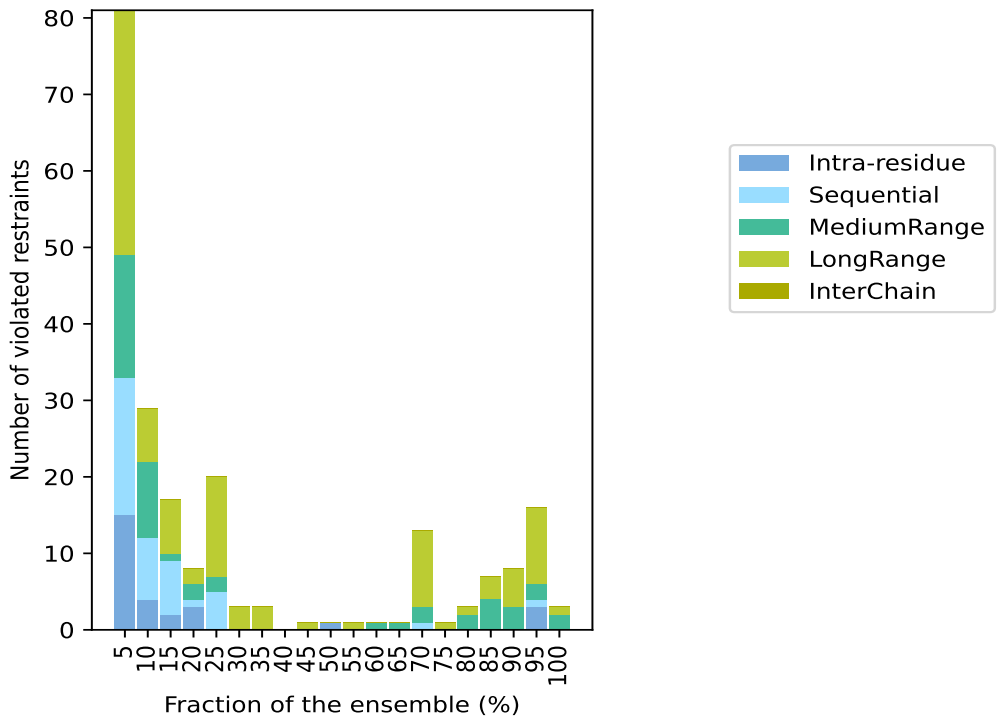
9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2034(IR:640, SQ:518, MR:266, LR:610, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
15	18	16	32	0	81	1	5.0
4	8	10	7	0	29	2	10.0
2	7	1	7	0	17	3	15.0
3	1	2	2	0	8	4	20.0
0	5	2	13	0	20	5	25.0
0	0	0	3	0	3	6	30.0
0	0	0	3	0	3	7	35.0
0	0	0	0	0	0	8	40.0
0	0	0	1	0	1	9	45.0
1	0	0	0	0	1	10	50.0
0	0	0	1	0	1	11	55.0
0	0	1	0	0	1	12	60.0
0	0	1	0	0	1	13	65.0
0	1	2	10	0	13	14	70.0
0	0	0	1	0	1	15	75.0
0	0	2	1	0	3	16	80.0
0	0	4	3	0	7	17	85.0
0	0	3	5	0	8	18	90.0
3	1	2	10	0	16	19	95.0
0	0	2	1	0	3	20	100.0

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

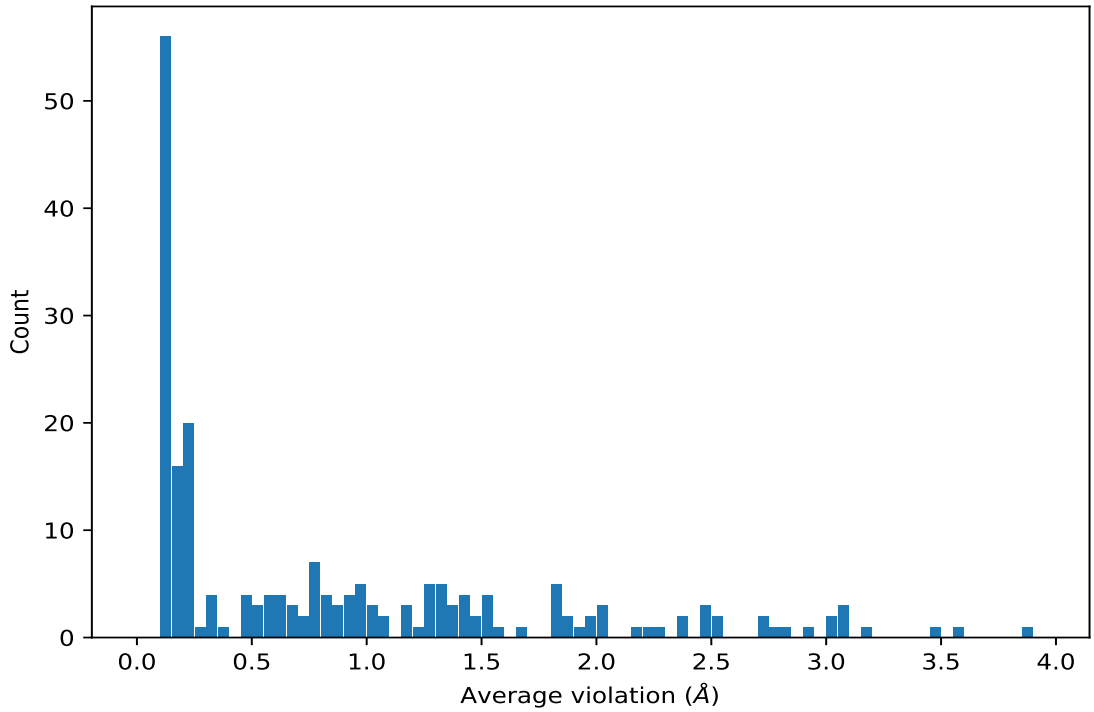
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	20	1.85	0.61	1.84
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	20	1.07	0.32	1.04
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	20	0.8	0.3	0.74
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	19	3.87	0.67	4.04
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	19	3.58	0.26	3.64
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	19	3.17	0.29	3.21
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	19	2.7	0.32	2.71
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	19	2.0	0.06	1.99
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	19	1.93	0.38	1.87
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	19	1.83	0.16	1.85
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	19	1.55	0.23	1.54
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	19	1.5	0.2	1.45
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	19	1.49	0.08	1.48
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	19	1.33	0.27	1.33
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	19	1.33	0.27	1.33
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	19	1.33	0.27	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	19	1.3	0.06	1.3
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	19	0.91	0.47	0.98
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	19	0.91	0.47	0.98
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	19	0.91	0.47	0.98
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	19	0.8	0.25	0.75
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	19	0.65	0.15	0.63
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	19	0.3	0.04	0.31
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	18	3.03	0.42	2.87
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	18	1.84	0.44	1.7
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	18	1.84	0.44	1.7
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	18	1.84	0.44	1.7
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	18	1.41	0.11	1.39
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	18	1.41	0.11	1.39
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	18	1.41	0.11	1.39
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	18	1.36	0.34	1.45
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	18	1.36	0.34	1.45
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	18	1.36	0.34	1.45
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	18	0.98	0.44	1.09
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	18	0.98	0.44	1.09
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	18	0.98	0.44	1.09
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	18	0.83	0.28	0.78
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	18	0.79	0.42	0.7
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	18	0.79	0.42	0.7
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	18	0.79	0.42	0.7
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	18	0.48	0.26	0.37
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	17	1.47	0.4	1.55
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	17	0.67	0.33	0.65
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	17	0.63	0.16	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	17	0.63	0.16	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	17	0.63	0.16	0.7
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	17	0.59	0.16	0.61
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	17	0.59	0.16	0.61
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	17	0.56	0.32	0.47
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	17	0.54	0.14	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	17	0.54	0.14	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	17	0.54	0.14	0.59
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	17	0.32	0.21	0.22
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	17	0.32	0.21	0.22
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	17	0.32	0.21	0.22
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	16	1.51	0.32	1.42
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	16	1.51	0.32	1.42
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	16	1.51	0.32	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	16	1.0	0.32	0.94
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	16	1.0	0.32	0.94
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	16	1.0	0.32	0.94
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	16	0.91	0.56	0.96
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	15	0.79	0.28	0.78
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	14	3.46	0.23	3.4
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	14	3.07	0.27	3.01
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	14	3.07	0.27	3.01
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	14	3.07	0.27	3.01
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	14	3.0	0.41	2.91
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	14	2.71	0.25	2.66
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	14	2.49	0.67	2.55
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	14	2.48	0.8	2.4
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	14	2.47	0.21	2.54
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	14	2.35	0.49	2.42
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	14	2.27	0.25	2.36
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	14	1.82	0.34	1.9
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	14	1.29	0.62	1.18
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	14	1.25	0.8	1.16
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	14	1.23	0.79	1.14
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	13	0.72	0.56	0.48
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	12	0.71	0.64	0.39
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	11	0.45	0.31	0.35
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	11	0.45	0.31	0.35
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	11	0.45	0.31	0.35
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	10	0.2	0.05	0.17
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	10	0.2	0.05	0.17
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	9	1.29	0.67	1.46
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	9	1.29	0.67	1.46
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	9	1.29	0.67	1.46
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	7	2.24	1.33	3.02
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	7	0.37	0.18	0.36
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	7	0.15	0.05	0.14
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	7	0.15	0.05	0.14
(1,2102)	1:A:73:TRP:HB3	1:A:81:PHE:HE2	6	0.6	0.29	0.53
(1,1731)	1:A:22:LYS:H	1:A:121:GLU:HG3	6	0.19	0.06	0.18
(1,2150)	1:A:89:HIS:HE1	1:A:110:LYS:HA	6	0.13	0.02	0.12
(1,1237)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HE1	5	2.93	0.12	3.0
(1,1622)	1:A:8:ARG:HD3	1:A:15:TYR:HD1	5	2.81	0.38	2.86
(1,1233)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HE1	5	2.77	0.12	2.8
(1,1632)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HE1	5	2.54	0.08	2.56
(1,1631)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HD1	5	2.5	0.13	2.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1236)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HD1	5	2.38	0.14	2.43
(1,1232)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HD1	5	2.16	0.26	2.28
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB2	5	2.04	0.23	2.0
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB3	5	2.04	0.23	2.0
(1,1670)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB3	5	1.99	0.98	2.6
(1,1240)	1:A:13:ASN:H	1:A:15:TYR:HE1	5	1.96	0.21	2.09
(1,714)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HD1	5	1.89	0.12	1.86
(1,1627)	1:A:8:ARG:HG2	1:A:15:TYR:HD1	5	1.7	0.47	1.75
(1,715)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HE1	5	1.31	0.16	1.31
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG21	5	1.16	0.29	0.99
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG22	5	1.16	0.29	0.99
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG23	5	1.16	0.29	0.99
(1,722)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:16:PHE:H	5	0.97	0.04	0.98
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE1	5	0.86	0.29	0.91
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE2	5	0.86	0.29	0.91
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE3	5	0.86	0.29	0.91
(1,1487)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:H	5	0.81	0.28	0.85
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE1	5	0.76	0.3	0.66
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE2	5	0.76	0.3	0.66
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE3	5	0.76	0.3	0.66
(1,1134)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:121:GLU:HA	5	0.24	0.06	0.2
(1,753)	1:A:22:LYS:HB2	1:A:23:THR:H	5	0.13	0.02	0.13
(2,20)	1:A:54:LEU:H	1:A:50:ILE:O	5	0.13	0.01	0.13
(2,10)	1:A:47:GLN:H	1:A:43:THR:O	5	0.12	0.01	0.12
(1,700)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:11:GLN:HG2	4	0.65	0.28	0.62
(1,1488)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:HA	4	0.64	0.2	0.58
(1,1239)	1:A:13:ASN:HB3	1:A:15:TYR:HE1	4	0.32	0.27	0.19
(1,1958)	1:A:56:ARG:HG2	1:A:106:TYR:HD2	4	0.24	0.18	0.14
(1,13)	1:A:8:ARG:HA	1:A:8:ARG:HD2	4	0.16	0.03	0.16
(1,55)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD22	4	0.13	0.02	0.12
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE2	1:A:14:CYS:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE3	1:A:14:CYS:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,394)	1:A:78:GLN:HG2	1:A:78:GLN:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,394)	1:A:78:GLN:HG3	1:A:78:GLN:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,1669)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB2	3	1.05	0.05	1.08
(1,1955)	1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:HE2	3	0.97	0.63	1.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB2	3	0.22	0.04	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB3	3	0.22	0.04	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB2	3	0.22	0.04	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB3	3	0.22	0.04	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB2	3	0.22	0.04	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB3	3	0.22	0.04	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,97)	1:A:21:ASN:H	1:A:21:ASN:HB3	3	0.18	0.01	0.18
(1,851)	1:A:48:ASN:HB3	1:A:49:PHE:H	3	0.18	0.02	0.18
(1,784)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:ASN:H	3	0.17	0.02	0.18
(1,784)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:ASN:H	3	0.17	0.02	0.18
(1,1969)	1:A:59:SER:HA	1:A:103:VAL:HB	3	0.17	0.04	0.17
(1,113)	1:A:22:LYS:H	1:A:22:LYS:HG2	3	0.17	0.05	0.15
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD2	1:A:91:ASN:H	3	0.17	0.02	0.16
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD3	1:A:91:ASN:H	3	0.17	0.02	0.16
(1,1234)	1:A:10:PHE:HB3	1:A:15:TYR:HE1	3	0.16	0.04	0.16
(1,1023)	1:A:90:LYS:HG2	1:A:91:ASN:H	3	0.15	0.04	0.15
(1,1807)	1:A:37:HIS:HD2	1:A:77:ASP:HB3	3	0.15	0.03	0.14
(2,60)	1:A:75:TRP:H	1:A:79:THR:O	3	0.14	0.0	0.14
(1,1141)	1:A:121:GLU:HG3	1:A:122:ALA:H	3	0.14	0.02	0.13
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG2	3	0.13	0.01	0.13
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG3	3	0.13	0.01	0.13
(1,1256)	1:A:22:LYS:HA	1:A:27:SER:H	3	0.13	0.02	0.12
(1,1610)	1:A:7:TRP:HZ2	1:A:34:MET:HG3	3	0.12	0.01	0.13
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD21	3	0.12	0.01	0.12
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD22	3	0.12	0.01	0.12
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD23	3	0.12	0.01	0.12
(1,1954)	1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:HD2	2	1.42	0.34	1.42
(1,1238)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:15:TYR:HE1	2	0.24	0.03	0.24
(1,1199)	1:A:135:ALA:HA	1:A:136:GLU:H	2	0.23	0.06	0.23
(1,1024)	1:A:90:LYS:HG3	1:A:91:ASN:H	2	0.22	0.06	0.22
(1,646)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	2	0.22	0.01	0.22
(1,745)	1:A:19:THR:H	1:A:20:ASP:H	2	0.22	0.04	0.22
(1,1776)	1:A:28:GLU:HA	1:A:38:LEU:HG	2	0.2	0.06	0.2
(1,818)	1:A:41:ILE:HG13	1:A:42:SER:H	2	0.2	0.06	0.2
(1,1312)	1:A:39:MET:HE1	1:A:41:ILE:HB	2	0.2	0.04	0.2
(1,1312)	1:A:39:MET:HE2	1:A:41:ILE:HB	2	0.2	0.04	0.2
(1,1312)	1:A:39:MET:HE3	1:A:41:ILE:HB	2	0.2	0.04	0.2
(1,1225)	1:A:141:GLN:HB3	1:A:142:SER:HB2	2	0.19	0.01	0.19
(1,429)	1:A:84:ARG:HD2	1:A:84:ARG:HB2	2	0.18	0.06	0.18
(1,429)	1:A:84:ARG:HD3	1:A:84:ARG:HB2	2	0.18	0.06	0.18
(1,138)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HG2	2	0.17	0.01	0.17
(1,1467)	1:A:89:HIS:H	1:A:92:GLU:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD11	2	0.15	0.02	0.15
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD12	2	0.15	0.02	0.15
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD13	2	0.15	0.02	0.15
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD11	2	0.15	0.02	0.15
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD12	2	0.15	0.02	0.15
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD13	2	0.15	0.02	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

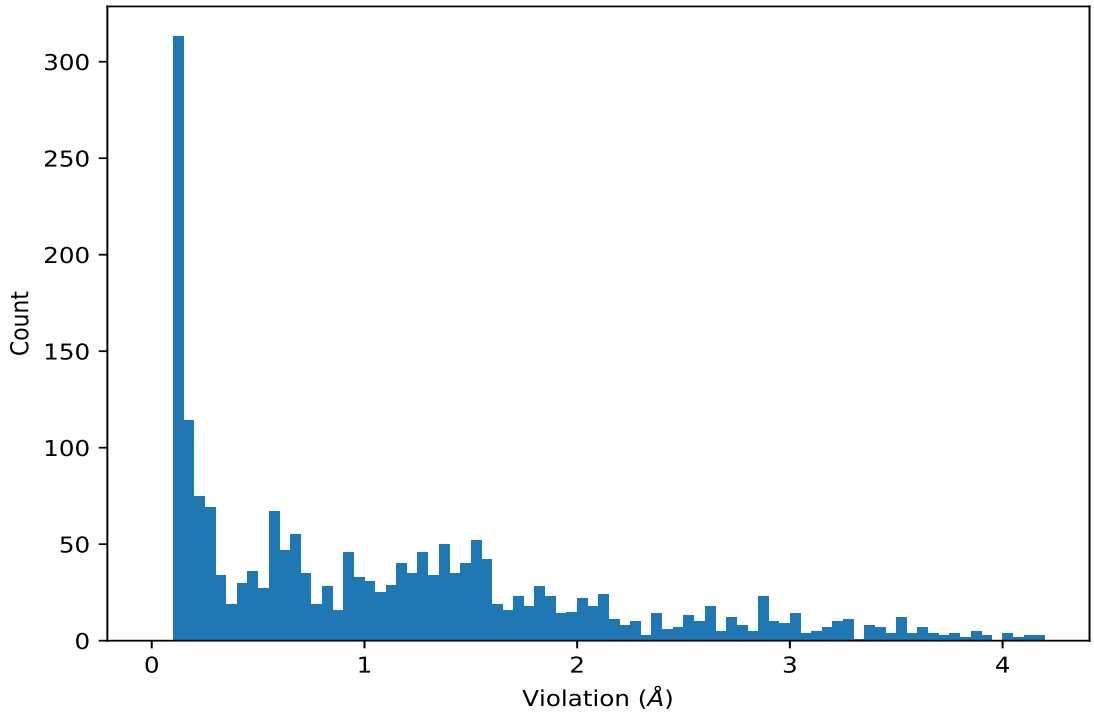
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD11	2	0.15	0.02	0.15
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD12	2	0.15	0.02	0.15
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD13	2	0.15	0.02	0.15
(1,1274)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HD2	2	0.14	0.01	0.14
(1,1274)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HD3	2	0.14	0.01	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG21	2	0.14	0.0	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG22	2	0.14	0.0	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG23	2	0.14	0.0	0.14
(1,2020)	1:A:60:TYR:H	1:A:103:VAL:HB	2	0.14	0.03	0.14
(1,1031)	1:A:96:SER:HA	1:A:97:GLN:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,1251)	1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:ASP:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,1564)	1:A:137:ASN:HA	1:A:140:PHE:HA	2	0.14	0.01	0.14
(1,1884)	1:A:43:THR:HA	1:A:85:ARG:HD3	2	0.14	0.02	0.14
(1,747)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:ASN:H	2	0.13	0.01	0.13
(1,1440)	1:A:78:GLN:HE21	1:A:80:PRO:HG2	2	0.13	0.02	0.13
(2,18)	1:A:51:ILE:H	1:A:47:GLN:O	2	0.13	0.0	0.13
(1,1040)	1:A:97:GLN:HG2	1:A:98:GLY:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,1040)	1:A:97:GLN:HG3	1:A:98:GLY:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB1	2	0.12	0.02	0.12
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB2	2	0.12	0.02	0.12
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB3	2	0.12	0.02	0.12
(1,1573)	1:A:139:TYR:HA	1:A:142:SER:HB2	2	0.12	0.02	0.12
(2,68)	1:A:112:ALA:H	1:A:105:VAL:O	2	0.12	0.01	0.12
(1,346)	1:A:68:ASN:H	1:A:68:ASN:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,1502)	1:A:108:GLN:H	1:A:110:LYS:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD11	2	0.12	0.0	0.12
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD12	2	0.12	0.0	0.12
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD13	2	0.12	0.0	0.12

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

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

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



9.5.2 Table : All distance violations (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	6	4.18
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	1	4.16
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	15	4.16
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	10	4.14
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	9	4.13
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	2	4.12
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	18	4.1
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	4	4.07
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	5	4.04
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	12	4.04
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	16	4.04
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	14	4.03
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	7	3.93
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	3	3.92
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	8	3.92
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	2	3.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	13	3.9
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	20	3.9
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	13	3.89
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	11	3.87
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	5	3.83
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	18	3.81
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	3	3.8
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	19	3.77
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	11	3.76
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	11	3.75
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	13	3.73
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	10	3.73
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	7	3.72
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	7	3.69
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	8	3.68
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	5	3.68
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	4	3.67
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	3	3.65
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	5	3.65
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	15	3.65
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	16	3.64
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	15	3.64
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	13	3.63
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	17	3.6
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	20	3.58
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	5	3.56
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	5	3.56
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	5	3.56
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	1	3.53
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	10	3.53
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	10	3.53
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	10	3.53
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	5	3.53
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	5	3.52
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	9	3.52
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	10	3.51
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	6	3.5
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	12	3.5
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	16	3.5
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	13	3.5
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	1	3.49
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	8	3.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	8	3.48
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	7	3.45
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	20	3.44
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	15	3.44
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	15	3.43
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	13	3.42
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	15	3.42
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	7	3.42
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	5	3.41
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	3	3.38
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	8	3.38
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	13	3.38
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	13	3.38
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	13	3.38
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	1	3.38
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	3	3.37
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	15	3.36
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	11	3.31
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	10	3.3
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	2	3.3
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	13	3.29
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	4	3.26
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	4	3.26
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	4	3.26
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	18	3.26
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	8	3.26
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	6	3.26
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	18	3.26
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	12	3.25
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	8	3.23
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	8	3.23
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	8	3.23
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	16	3.22
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	20	3.21
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	3	3.21
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	3	3.21
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	3	3.21
(1,1622)	1:A:8:ARG:HD3	1:A:15:TYR:HD1	12	3.21
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	12	3.21
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	13	3.18
(1,1622)	1:A:8:ARG:HD3	1:A:15:TYR:HD1	18	3.17
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	5	3.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	1	3.16
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	1	3.16
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	1	3.16
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	18	3.16
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	14	3.15
(1,1485)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HD1	11	3.14
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	7	3.13
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	14	3.13
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	4	3.12
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	11	3.07
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	9	3.06
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	15	3.06
(1,1237)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HE1	12	3.06
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	6	3.04
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	3	3.04
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	19	3.03
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	15	3.03
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	15	3.03
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	15	3.03
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	5	3.03
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	2	3.02
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	2	3.02
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	13	3.02
(1,1237)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HE1	3	3.01
(1,2133)	1:A:87:PHE:HD2	1:A:113:TRP:HZ2	10	3.0
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	8	3.0
(1,1237)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HE1	18	3.0
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	18	2.99
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	18	2.99
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	18	2.99
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	10	2.98
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	4	2.96
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	6	2.96
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	8	2.95
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	15	2.95
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	10	2.95
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	2	2.94
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	7	2.92
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	7	2.92
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	7	2.92
(1,1670)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB3	14	2.92
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	2	2.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	17	2.92
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	10	2.92
(1,1233)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HE1	18	2.92
(1,2132)	1:A:87:PHE:HD2	1:A:113:TRP:HH2	10	2.91
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	3	2.9
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	13	2.89
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	15	2.89
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	2	2.89
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	2	2.89
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	2	2.89
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	15	2.89
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	14	2.88
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	17	2.88
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	17	2.88
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	17	2.88
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	19	2.88
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	3	2.88
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	8	2.87
(1,1233)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HE1	12	2.87
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	5	2.86
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	6	2.86
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	6	2.86
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	6	2.86
(1,1622)	1:A:8:ARG:HD3	1:A:15:TYR:HD1	2	2.86
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	1	2.85
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	1	2.85
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	10	2.85
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	13	2.84
(1,1237)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HE1	2	2.84
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	10	2.82
(1,1670)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB3	12	2.82
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	18	2.82
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	10	2.8
(1,1233)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HE1	3	2.8
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	4	2.78
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	11	2.75
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	11	2.75
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	11	2.75
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	10	2.75
(1,1237)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HE1	14	2.75
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	7	2.74
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	2	2.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	6	2.73
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	18	2.72
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	18	2.72
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	1	2.71
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	12	2.71
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	8	2.71
(1,1233)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HE1	14	2.71
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	5	2.7
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	9	2.7
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	2	2.7
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	18	2.69
(1,1632)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HE1	18	2.67
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	11	2.67
(1,2011)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:HB2	17	2.66
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	5	2.66
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	16	2.65
(1,1631)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HD1	14	2.65
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	11	2.65
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	17	2.65
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	8	2.65
(1,1622)	1:A:8:ARG:HD3	1:A:15:TYR:HD1	14	2.64
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	7	2.64
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	17	2.64
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	7	2.64
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	17	2.63
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	13	2.63
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD11	1:A:106:TYR:HD2	14	2.61
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD12	1:A:106:TYR:HD2	14	2.61
(1,1913)	1:A:51:ILE:HD13	1:A:106:TYR:HD2	14	2.61
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	17	2.61
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	6	2.61
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	10	2.61
(1,1670)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB3	18	2.6
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	6	2.59
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	1	2.59
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	10	2.59
(1,1632)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HE1	3	2.57
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	3	2.57
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	6	2.57
(1,1233)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HE1	2	2.57
(1,1632)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HE1	12	2.56
(1,1631)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HD1	12	2.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	2	2.56
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	3	2.55
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	5	2.55
(1,2017)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HZ2	9	2.54
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	10	2.54
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	15	2.54
(1,1236)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HD1	12	2.54
(1,1631)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HD1	3	2.53
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	11	2.53
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	14	2.53
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	10	2.52
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	2	2.52
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	15	2.51
(1,1631)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HD1	18	2.5
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	20	2.48
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	3	2.48
(1,1236)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HD1	3	2.48
(1,1632)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HE1	14	2.47
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	12	2.45
(1,1985)	1:A:59:SER:HB2	1:A:120:PHE:HE1	13	2.45
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	14	2.45
(1,1632)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HE1	2	2.44
(1,1232)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HD1	14	2.44
(1,1236)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HD1	14	2.43
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	4	2.42
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	3	2.42
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	11	2.42
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	11	2.4
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	1	2.4
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	8	2.4
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	7	2.39
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	11	2.39
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	3	2.38
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	19	2.37
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	18	2.37
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	14	2.36
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	2	2.36
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	3	2.36
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	14	2.35
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	14	2.35
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	14	2.35
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB2	18	2.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB3	18	2.32
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	1	2.32
(1,1492)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HE1	11	2.29
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	2	2.29
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	8	2.29
(1,1236)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HD1	18	2.29
(1,1232)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HD1	12	2.29
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	3	2.28
(1,1232)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HD1	3	2.28
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB2	12	2.27
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB3	12	2.27
(1,1631)	1:A:9:ALA:HA	1:A:15:TYR:HD1	2	2.25
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	17	2.24
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	17	2.24
(1,1491)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:HD1	14	2.23
(1,1627)	1:A:8:ARG:HG2	1:A:15:TYR:HD1	12	2.22
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	17	2.22
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	2	2.22
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	17	2.22
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	1	2.2
(1,1240)	1:A:13:ASN:H	1:A:15:TYR:HE1	12	2.19
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	13	2.18
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	13	2.18
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	13	2.18
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	9	2.18
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	10	2.17
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	10	2.17
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	10	2.17
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	12	2.17
(1,1622)	1:A:8:ARG:HD3	1:A:15:TYR:HD1	3	2.17
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	1	2.16
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	3	2.14
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	3	2.14
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	3	2.14
(1,1236)	1:A:10:PHE:H	1:A:15:TYR:HD1	2	2.14
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	7	2.13
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	6	2.13
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	6	2.13
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	6	2.13
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	5	2.13
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	17	2.12
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	1	2.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	6	2.11
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	13	2.11
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	13	2.11
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	13	2.11
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	13	2.11
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	10	2.11
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	12	2.11
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	18	2.11
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	13	2.1
(1,714)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HD1	2	2.1
(1,1627)	1:A:8:ARG:HG2	1:A:15:TYR:HD1	18	2.1
(1,1240)	1:A:13:ASN:H	1:A:15:TYR:HE1	3	2.1
(1,1232)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HD1	18	2.1
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	20	2.09
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	7	2.09
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	8	2.09
(1,1240)	1:A:13:ASN:H	1:A:15:TYR:HE1	2	2.09
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	8	2.08
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	8	2.08
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	3	2.07
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	9	2.07
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	11	2.07
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	4	2.07
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	4	2.07
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	4	2.07
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	13	2.07
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	15	2.07
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	1	2.06
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	1	2.06
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	1	2.06
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	8	2.06
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	18	2.05
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	17	2.05
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	1	2.05
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	1	2.04
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	17	2.03
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	13	2.03
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	20	2.03
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	15	2.02
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	13	2.02
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	7	2.01
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	10	2.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	1	2.01
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	18	2.01
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	8	2.01
(1,2016)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:105:VAL:HA	4	2.0
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	5	2.0
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	9	2.0
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB2	2	2.0
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB3	2	2.0
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	15	2.0
(1,1486)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HE1	11	2.0
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	11	2.0
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	5	1.99
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	4	1.99
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	12	1.99
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	18	1.99
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	2	1.98
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	16	1.98
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	1	1.98
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	1	1.97
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	6	1.97
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	8	1.97
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	13	1.97
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	17	1.97
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	4	1.96
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	18	1.96
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	1	1.96
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	2	1.95
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	6	1.95
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	7	1.95
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	12	1.95
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	6	1.95
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	10	1.95
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	14	1.94
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	19	1.93
(1,714)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HD1	18	1.93
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	3	1.93
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	13	1.93
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	18	1.93
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	2	1.93
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	18	1.92
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	12	1.9
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	19	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	19	1.9
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	19	1.9
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	9	1.89
(1,906)	1:A:59:SER:HA	1:A:60:TYR:HD2	18	1.88
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	16	1.88
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	16	1.88
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	16	1.88
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	3	1.88
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	3	1.88
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	3	1.88
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	13	1.87
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	7	1.87
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	4	1.87
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	17	1.87
(1,714)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HD1	3	1.86
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	10	1.86
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB2	14	1.86
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB3	14	1.86
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	12	1.86
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	5	1.85
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	15	1.85
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	16	1.84
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	18	1.84
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	13	1.83
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	13	1.83
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	13	1.83
(1,1484)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:HA	14	1.83
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	17	1.82
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	17	1.82
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	17	1.82
(1,714)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HD1	12	1.81
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	6	1.81
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	6	1.81
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	6	1.81
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	19	1.81
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	5	1.81
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	8	1.81
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	19	1.81
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	13	1.8
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	13	1.8
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	13	1.8
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	19	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	19	1.8
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	19	1.8
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	5	1.8
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	16	1.8
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	3	1.8
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	3	1.8
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	3	1.8
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	4	1.79
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	7	1.79
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	7	1.79
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	18	1.78
(1,1240)	1:A:13:ASN:H	1:A:15:TYR:HE1	18	1.78
(1,714)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HD1	14	1.77
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	11	1.77
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	14	1.77
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	14	1.77
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	14	1.77
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	6	1.77
(1,1954)	1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:HD2	10	1.76
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	1	1.76
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	17	1.75
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	17	1.75
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	17	1.75
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	20	1.75
(1,1627)	1:A:8:ARG:HG2	1:A:15:TYR:HD1	2	1.75
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	7	1.74
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	3	1.74
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	5	1.74
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	2	1.73
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	2	1.73
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	2	1.73
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB2	3	1.73
(1,1673)	1:A:15:TYR:HD1	1:A:8:ARG:HB3	3	1.73
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	12	1.73
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	4	1.72
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	11	1.72
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	17	1.72
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	7	1.72
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	16	1.72
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	20	1.72
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	20	1.71
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	20	1.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	20	1.71
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	10	1.71
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG21	2	1.71
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG22	2	1.71
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG23	2	1.71
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	5	1.71
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	20	1.7
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	14	1.7
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	14	1.7
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	14	1.7
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	1	1.7
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	5	1.69
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	5	1.69
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	5	1.69
(1,1232)	1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:TYR:HD1	2	1.69
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	10	1.68
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	10	1.68
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	10	1.68
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	6	1.68
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	2	1.67
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	2	1.67
(1,1240)	1:A:13:ASN:H	1:A:15:TYR:HE1	14	1.66
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	14	1.63
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	14	1.63
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	14	1.63
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	18	1.63
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	18	1.63
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	18	1.63
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	4	1.62
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	8	1.62
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	8	1.62
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	8	1.62
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	18	1.62
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	18	1.62
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	18	1.62
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	7	1.62
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	16	1.62
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	3	1.62
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	10	1.61
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	13	1.6
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	10	1.6
(1,715)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HE1	2	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1955)	1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:HE2	10	1.59
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	15	1.59
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	15	1.59
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	15	1.59
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	15	1.59
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	15	1.59
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	4	1.59
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	4	1.59
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	4	1.59
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	1	1.59
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	1	1.59
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	1	1.59
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	2	1.59
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	2	1.59
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	2	1.59
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	8	1.58
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	8	1.58
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	8	1.58
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	6	1.58
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	6	1.58
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	6	1.58
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	8	1.57
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	15	1.57
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	19	1.57
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	2	1.57
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	2	1.57
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	2	1.57
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	16	1.57
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	16	1.57
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	16	1.57
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	9	1.56
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	10	1.56
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	6	1.56
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	1	1.55
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	12	1.55
(1,1880)	1:A:41:ILE:HG21	1:A:87:PHE:HD2	10	1.55
(1,1880)	1:A:41:ILE:HG22	1:A:87:PHE:HD2	10	1.55
(1,1880)	1:A:41:ILE:HG23	1:A:87:PHE:HD2	10	1.55
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	1	1.55
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	15	1.55
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	7	1.55
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	5	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	2	1.54
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	2	1.54
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	2	1.54
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	16	1.53
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	19	1.53
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	15	1.53
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	6	1.53
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	18	1.53
(1,1627)	1:A:8:ARG:HG2	1:A:15:TYR:HD1	14	1.53
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	6	1.53
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	6	1.53
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	6	1.53
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	16	1.53
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	16	1.53
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	16	1.53
(1,1483)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:111:TRP:H	14	1.53
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	6	1.52
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	14	1.52
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	14	1.52
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	14	1.52
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	6	1.52
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	6	1.52
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	6	1.52
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	9	1.52
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	9	1.52
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	9	1.52
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	18	1.51
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	11	1.51
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	11	1.51
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	11	1.51
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	12	1.51
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	12	1.51
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	12	1.51
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	10	1.51
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	10	1.51
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	10	1.51
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	16	1.51
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	4	1.51
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	4	1.51
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	4	1.51
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	13	1.51
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	13	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	13	1.51
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	11	1.51
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	11	1.51
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	11	1.51
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	6	1.5
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	11	1.5
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	5	1.5
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	5	1.5
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	5	1.5
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	9	1.49
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	9	1.49
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	9	1.49
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	7	1.49
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	7	1.49
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	7	1.49
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	11	1.49
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	11	1.49
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	11	1.49
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	18	1.49
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	18	1.49
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	18	1.49
(1,1408)	1:A:58:LEU:HA	1:A:60:TYR:HE2	19	1.49
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	1	1.48
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	11	1.48
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	15	1.48
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	6	1.48
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	6	1.48
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	6	1.48
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	3	1.48
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	2	1.48
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	2	1.48
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	2	1.48
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	3	1.47
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	3	1.47
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	13	1.47
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	13	1.47
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	13	1.47
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	11	1.47
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	5	1.46
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	17	1.46
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	18	1.46
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	18	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	18	1.46
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	1	1.46
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	1	1.46
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	1	1.46
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	8	1.46
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	8	1.46
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	8	1.46
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	8	1.45
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	5	1.45
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	10	1.45
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	10	1.45
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	10	1.45
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	6	1.45
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	11	1.45
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	12	1.44
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	7	1.44
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	7	1.44
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	7	1.44
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	15	1.44
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	2	1.44
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	5	1.44
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	7	1.44
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	10	1.44
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	10	1.44
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	10	1.44
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	10	1.44
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	6	1.43
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	2	1.42
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	15	1.42
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	15	1.42
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	15	1.42
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	16	1.42
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	16	1.42
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	16	1.42
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	9	1.41
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	2	1.41
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	6	1.41
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	6	1.41
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	6	1.41
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	18	1.41
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	18	1.41
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	18	1.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	8	1.4
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	15	1.4
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	17	1.4
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	18	1.4
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	18	1.4
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	18	1.4
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	12	1.4
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	12	1.4
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	12	1.4
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	17	1.39
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	7	1.38
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	8	1.38
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	5	1.38
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	15	1.38
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	18	1.38
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	18	1.38
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	18	1.38
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	12	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	4	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	4	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	4	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	13	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	13	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	13	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	18	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	18	1.38
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	18	1.38
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	5	1.38
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	13	1.37
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	15	1.37
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	15	1.37
(1,2182)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	15	1.37
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	4	1.36
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	10	1.36
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	15	1.36
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	11	1.36
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	9	1.36
(1,715)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HE1	18	1.35
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	6	1.35
(1,308)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HE2	20	1.35
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	6	1.35
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	3	1.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	3	1.35
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	3	1.35
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	8	1.35
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	8	1.35
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	8	1.35
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	12	1.35
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	12	1.35
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	12	1.35
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	1	1.34
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	1	1.34
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	1	1.34
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	17	1.33
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	19	1.33
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	10	1.33
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	10	1.33
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	10	1.33
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	10	1.33
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	5	1.33
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	9	1.33
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	9	1.33
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	9	1.33
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	16	1.32
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	5	1.32
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	5	1.32
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	5	1.32
(1,715)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HE1	3	1.31
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	18	1.31
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	19	1.31
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	11	1.3
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	8	1.3
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	20	1.3
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	20	1.3
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	20	1.3
(1,1694)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:60:TYR:HE1	5	1.3
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE1	14	1.3
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE2	14	1.3
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE3	14	1.3
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	10	1.3
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	11	1.3
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	11	1.3
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	11	1.3
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	6	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	1	1.29
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	15	1.29
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	9	1.29
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	9	1.29
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	9	1.29
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	7	1.29
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	7	1.29
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	7	1.29
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	5	1.29
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	5	1.29
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	5	1.29
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	11	1.29
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	11	1.29
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	11	1.29
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	12	1.28
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	4	1.28
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	4	1.28
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	4	1.28
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	17	1.28
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	20	1.28
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	12	1.28
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	12	1.28
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	12	1.28
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	3	1.27
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	9	1.27
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	9	1.27
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	9	1.27
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	2	1.26
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	3	1.26
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	5	1.26
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	3	1.26
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	15	1.26
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	20	1.26
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	11	1.26
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	17	1.26
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	4	1.26
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	4	1.26
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	4	1.26
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	6	1.25
(1,2248)	1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ASN:HA	13	1.25
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	15	1.25
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	8	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	8	1.25
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	8	1.25
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	7	1.25
(1,1490)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:111:TRP:H	14	1.25
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	20	1.24
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	20	1.24
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	20	1.24
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	20	1.24
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	11	1.24
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	16	1.24
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	16	1.24
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	16	1.24
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	3	1.24
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	3	1.24
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	3	1.24
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	3	1.24
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	16	1.23
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	3	1.23
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	3	1.23
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	3	1.23
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	7	1.23
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	7	1.23
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	7	1.23
(1,2010)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:124:ARG:H	9	1.22
(1,1691)	1:A:17:PRO:HA	1:A:60:TYR:HE1	13	1.22
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	19	1.22
(1,1487)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:H	14	1.22
(1,1955)	1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:HE2	1	1.21
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE1	14	1.21
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE2	14	1.21
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE3	14	1.21
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	6	1.21
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	20	1.21
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	20	1.21
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	20	1.21
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	15	1.21
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	15	1.21
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	15	1.21
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	9	1.21
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	12	1.2
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	12	1.2
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	12	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG21	18	1.2
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG22	18	1.2
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG23	18	1.2
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	10	1.2
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	10	1.2
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	10	1.2
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	7	1.2
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	14	1.19
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB1	20	1.19
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB2	20	1.19
(1,1533)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HB3	20	1.19
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	4	1.19
(1,307)	1:A:60:TYR:H	1:A:60:TYR:HD2	7	1.18
(1,2102)	1:A:73:TRP:HB3	1:A:81:PHE:HE2	13	1.18
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	15	1.18
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	15	1.18
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	15	1.18
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	9	1.18
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	9	1.18
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	9	1.18
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	12	1.18
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	13	1.18
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	13	1.18
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	8	1.18
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	8	1.18
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	8	1.18
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	1	1.18
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	1	1.18
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	1	1.18
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	9	1.18
(1,715)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HE1	12	1.17
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	12	1.17
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	12	1.17
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	12	1.17
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	16	1.16
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	16	1.16
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	16	1.16
(1,715)	1:A:14:CYS:HA	1:A:15:TYR:HE1	14	1.15
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	2	1.15
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	2	1.15
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	2	1.15
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	11	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	14	1.14
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	19	1.14
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	20	1.13
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	20	1.13
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	20	1.13
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	18	1.12
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	14	1.12
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	14	1.12
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	14	1.12
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	15	1.12
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	15	1.12
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	15	1.12
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	10	1.11
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	10	1.11
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	10	1.11
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	13	1.11
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	13	1.11
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	13	1.11
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	1	1.11
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	1	1.11
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	9	1.1
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	9	1.1
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	9	1.1
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	2	1.1
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	7	1.09
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	7	1.09
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	7	1.09
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	15	1.09
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	15	1.09
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	15	1.09
(1,1669)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB2	12	1.09
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	2	1.09
(1,1670)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB3	2	1.08
(1,1669)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB2	14	1.08
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	20	1.08
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	14	1.08
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	15	1.08
(1,1995)	1:A:59:SER:HB3	1:A:120:PHE:HE1	17	1.07
(1,1954)	1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:HD2	1	1.07
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	2	1.07
(1,700)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:11:GLN:HG2	4	1.06
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	17	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	10	1.06
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	10	1.06
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	10	1.06
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	19	1.06
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	13	1.05
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	13	1.05
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	13	1.05
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	8	1.04
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	8	1.04
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	8	1.04
(1,1870)	1:A:41:ILE:HD11	1:A:87:PHE:HD2	10	1.04
(1,1870)	1:A:41:ILE:HD12	1:A:87:PHE:HD2	10	1.04
(1,1870)	1:A:41:ILE:HD13	1:A:87:PHE:HD2	10	1.04
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	10	1.04
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	17	1.04
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	17	1.04
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	15	1.04
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	9	1.03
(1,722)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:16:PHE:H	3	1.02
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	9	1.02
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	9	1.02
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	9	1.02
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	17	1.02
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	16	1.01
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	16	1.01
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	16	1.01
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE1	3	1.01
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE2	3	1.01
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE3	3	1.01
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	6	1.01
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HE1	20	1.01
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HE1	20	1.01
(1,1522)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HE1	20	1.01
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	13	1.0
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	13	1.0
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	13	1.0
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	5	1.0
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	9	1.0
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE1	2	0.99
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE2	2	0.99
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE3	2	0.99
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG21	3	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG22	3	0.99
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG23	3	0.99
(1,722)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:16:PHE:H	2	0.98
(1,722)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:16:PHE:H	18	0.98
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	7	0.98
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	7	0.98
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	7	0.98
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	8	0.98
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	12	0.98
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	7	0.97
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	7	0.97
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	7	0.97
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	4	0.97
(1,1669)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB2	18	0.97
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	2	0.97
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	2	0.97
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	2	0.97
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	13	0.97
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	13	0.97
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	13	0.97
(1,722)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:16:PHE:H	12	0.96
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG21	14	0.96
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG22	14	0.96
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG23	14	0.96
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	1	0.96
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	16	0.96
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	16	0.96
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	16	0.96
(1,1488)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:HA	14	0.96
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	7	0.95
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	1	0.94
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	6	0.94
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	6	0.94
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	6	0.94
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	6	0.94
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	15	0.94
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	18	0.94
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	20	0.94
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	3	0.94
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	18	0.93
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	18	0.93
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	18	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	5	0.93
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	5	0.93
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	17	0.93
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	18	0.93
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	1	0.92
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	1	0.92
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	1	0.92
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	1	0.92
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG21	12	0.92
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG22	12	0.92
(1,1667)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:125:ILE:HG23	12	0.92
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	5	0.92
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	16	0.92
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	4	0.91
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE1	2	0.91
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE2	2	0.91
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE3	2	0.91
(1,1627)	1:A:8:ARG:HG2	1:A:15:TYR:HD1	3	0.91
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	9	0.91
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	18	0.91
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	18	0.91
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	18	0.91
(1,1489)	1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:LYS:HA	14	0.91
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	17	0.91
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	12	0.9
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	2	0.9
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	2	0.9
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	2	0.9
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	9	0.9
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	11	0.9
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	9	0.9
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	9	0.9
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	9	0.9
(1,722)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:16:PHE:H	14	0.89
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	13	0.89
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	11	0.89
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	11	0.89
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	11	0.89
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	6	0.89
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	6	0.89
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	6	0.89
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	16	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	3	0.88
(1,1487)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:H	6	0.88
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	14	0.87
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	11	0.87
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	11	0.87
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	11	0.87
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	13	0.86
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	8	0.85
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	8	0.85
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	8	0.85
(1,1487)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:H	17	0.85
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	5	0.85
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	12	0.84
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	5	0.83
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	6	0.83
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	6	0.83
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	6	0.83
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	2	0.83
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	18	0.83
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	16	0.82
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	16	0.82
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	18	0.82
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	9	0.82
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	10	0.82
(1,1011)	1:A:86:VAL:HA	1:A:87:PHE:HD2	10	0.82
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	3	0.81
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	7	0.81
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	9	0.8
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	9	0.8
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	11	0.8
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	11	0.8
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	11	0.8
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	9	0.8
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	9	0.8
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	9	0.8
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	18	0.79
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	6	0.79
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	8	0.79
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	2	0.78
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	2	0.78
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	2	0.78
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	16	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	16	0.78
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	5	0.78
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	6	0.78
(1,1239)	1:A:13:ASN:HB3	1:A:15:TYR:HE1	2	0.78
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	18	0.77
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	17	0.76
(1,1635)	1:A:10:PHE:HD2	1:A:49:PHE:HB3	13	0.76
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	3	0.76
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	18	0.75
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	6	0.75
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	19	0.75
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	7	0.75
(1,1487)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:H	7	0.74
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	7	0.73
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	1	0.73
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	7	0.73
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	7	0.73
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	7	0.73
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	11	0.73
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	11	0.73
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	11	0.73
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	7	0.72
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	10	0.72
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	3	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	8	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	8	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	8	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	10	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	10	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	10	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	16	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	16	0.72
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	16	0.72
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	11	0.71
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	11	0.71
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	3	0.71
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	6	0.71
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	18	0.71
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	18	0.71
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	18	0.71
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	2	0.71
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	2	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	2	0.71
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	3	0.71
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	3	0.71
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	3	0.71
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	16	0.71
(1,2102)	1:A:73:TRP:HB3	1:A:81:PHE:HE2	10	0.7
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	3	0.7
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	3	0.7
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	20	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	5	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	5	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	5	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	13	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	13	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	13	0.7
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	11	0.7
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	15	0.7
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	12	0.69
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	12	0.69
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	12	0.69
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	13	0.69
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	11	0.69
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	10	0.68
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	2	0.68
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	2	0.68
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	2	0.68
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	8	0.68
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	1	0.68
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	1	0.68
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	1	0.68
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	1	0.67
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	1	0.67
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	3	0.67
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	12	0.67
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	12	0.67
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	12	0.67
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	18	0.67
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	15	0.67
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	15	0.67
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	15	0.67
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	15	0.67
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	15	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	15	0.67
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	18	0.67
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	18	0.67
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	18	0.67
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	10	0.67
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	10	0.67
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	10	0.67
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	11	0.66
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	14	0.66
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE1	12	0.66
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE2	12	0.66
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE3	12	0.66
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	12	0.66
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	20	0.65
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	11	0.65
(1,1488)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:HA	6	0.65
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	4	0.65
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	8	0.65
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	8	0.64
(1,1637)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:46:GLU:HA	8	0.64
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	9	0.64
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	9	0.64
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	9	0.64
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	12	0.64
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	19	0.64
(1,700)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:11:GLN:HG2	9	0.63
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	16	0.63
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	16	0.63
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	16	0.63
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	2	0.63
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	4	0.63
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	1	0.63
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	8	0.63
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	8	0.63
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	8	0.63
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	8	0.63
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	13	0.63
(1,700)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:11:GLN:HG2	7	0.62
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	13	0.62
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	13	0.62
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	5	0.62
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	10	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	10	0.62
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	10	0.62
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	7	0.62
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	2	0.61
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	2	0.61
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	12	0.61
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	12	0.61
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE1	18	0.61
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE2	18	0.61
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE3	18	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	1	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	1	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	1	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	5	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	5	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	5	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	16	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	16	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	16	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	18	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	18	0.61
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	18	0.61
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	1	0.61
(1,2131)	1:A:87:PHE:HD2	1:A:113:TRP:HE1	10	0.6
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	5	0.6
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	5	0.6
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	5	0.6
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	20	0.6
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	20	0.6
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	20	0.6
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	9	0.6
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	2	0.6
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	15	0.6
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	1	0.6
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	1	0.6
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	1	0.6
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	12	0.6
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	12	0.6
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	12	0.6
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	10	0.59
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	10	0.59
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:120:PHE:HD1	20	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:120:PHE:HD1	20	0.59
(1,1521)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:120:PHE:HD1	20	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	2	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	2	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	2	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	7	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	7	0.59
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	7	0.59
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	19	0.58
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	19	0.58
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	19	0.58
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	11	0.58
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	11	0.58
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	11	0.58
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	11	0.58
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	11	0.58
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	9	0.57
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	6	0.57
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	3	0.57
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	3	0.57
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	3	0.57
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	11	0.57
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	11	0.57
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	11	0.57
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	17	0.57
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	17	0.57
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	17	0.57
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	10	0.57
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	3	0.57
(1,2102)	1:A:73:TRP:HB3	1:A:81:PHE:HE2	9	0.56
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	13	0.56
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	13	0.56
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	13	0.56
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	6	0.55
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	6	0.55
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	6	0.55
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	8	0.55
(1,1958)	1:A:56:ARG:HG2	1:A:106:TYR:HD2	10	0.55
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	4	0.55
(1,1670)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:127:LYS:HB3	3	0.55
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	18	0.55
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	20	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	20	0.55
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	20	0.55
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	15	0.55
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	15	0.55
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	15	0.55
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	20	0.55
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	8	0.54
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	8	0.54
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE1	18	0.54
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE2	18	0.54
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE3	18	0.54
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	9	0.54
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	9	0.54
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	9	0.54
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	2	0.54
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	6	0.54
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	19	0.53
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	19	0.53
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	13	0.53
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	6	0.53
(1,1887)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:87:PHE:HE1	10	0.52
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	5	0.52
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	5	0.52
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	5	0.52
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	19	0.52
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	3	0.52
(1,2009)	1:A:60:TYR:HD1	1:A:123:SER:HB3	20	0.51
(1,1488)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:HA	17	0.51
(1,2102)	1:A:73:TRP:HB3	1:A:81:PHE:HE2	14	0.5
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	6	0.5
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	6	0.5
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	20	0.5
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	2	0.5
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE1	12	0.49
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE2	12	0.49
(1,1671)	1:A:15:TYR:HD2	1:A:39:MET:HE3	12	0.49
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	14	0.49
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	20	0.49
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	20	0.49
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	20	0.49
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	2	0.48
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	4	0.48
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	12	0.48
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	15	0.47
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	15	0.47
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	18	0.47
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	18	0.47
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	1	0.47
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	16	0.47
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	4	0.47
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	4	0.46
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	4	0.46
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	4	0.46
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	8	0.46
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	8	0.46
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	8	0.46
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	4	0.45
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	4	0.45
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	4	0.45
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	8	0.45
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	8	0.45
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	8	0.45
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	14	0.45
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	14	0.45
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	14	0.45
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	13	0.45
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	13	0.45
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	13	0.45
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	7	0.44
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	7	0.44
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	1	0.44
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	1	0.44
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	1	0.44
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	4	0.44
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	4	0.44
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	4	0.44
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	1	0.44
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	6	0.44
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	12	0.43
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	18	0.43
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	14	0.43
(1,1488)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:HA	7	0.43
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	2	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	1	0.42
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	18	0.41
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	10	0.41
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	10	0.41
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	10	0.41
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	10	0.4
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	10	0.4
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	1	0.4
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	1	0.4
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	1	0.4
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE1	3	0.4
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE2	3	0.4
(1,1674)	1:A:15:TYR:HE2	1:A:39:MET:HE3	3	0.4
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	13	0.4
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	6	0.4
(1,274)	1:A:56:ARG:H	1:A:56:ARG:HG2	19	0.39
(1,2102)	1:A:73:TRP:HB3	1:A:81:PHE:HE2	2	0.39
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	13	0.39
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	11	0.39
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	2	0.39
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	15	0.39
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	5	0.38
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	5	0.38
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	5	0.38
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	12	0.36
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	7	0.36
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	14	0.36
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	17	0.36
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	3	0.36
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	3	0.36
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	3	0.36
(1,1722)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HD1	4	0.36
(1,1722)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HD1	4	0.36
(1,1722)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HD1	4	0.36
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	5	0.35
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	5	0.35
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	5	0.35
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	4	0.35
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	4	0.35
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	1	0.34
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	5	0.34
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	7	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	9	0.34
(1,1487)	1:A:106:TYR:HE1	1:A:109:ASP:H	1	0.34
(1,1134)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:121:GLU:HA	15	0.34
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	3	0.33
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	7	0.33
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	3	0.33
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	8	0.33
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	8	0.33
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	8	0.33
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	16	0.33
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	7	0.33
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	3	0.32
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	4	0.32
(1,1952)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HE2	18	0.32
(1,1951)	1:A:56:ARG:HD2	1:A:106:TYR:HD2	18	0.32
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	7	0.32
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG11	1:A:120:PHE:HD1	17	0.32
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:PHE:HD1	17	0.32
(1,1518)	1:A:116:VAL:HG13	1:A:120:PHE:HD1	17	0.32
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	2	0.31
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	8	0.31
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	13	0.31
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	16	0.31
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	19	0.31
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	16	0.31
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	13	0.31
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	11	0.3
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	18	0.3
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	11	0.3
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	11	0.3
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	11	0.3
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB2	20	0.3
(1,2018)	1:A:60:TYR:HE2	1:A:54:LEU:HB3	20	0.3
(1,1731)	1:A:22:LYS:H	1:A:121:GLU:HG3	5	0.3
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	18	0.3
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	10	0.3
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	16	0.3
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	17	0.3
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	18	0.3
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	20	0.3
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	6	0.29
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	2	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB1	19	0.29
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB2	19	0.29
(1,1531)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:122:ALA:HB3	19	0.29
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	9	0.29
(1,1406)	1:A:55:ASP:H	1:A:60:TYR:HE2	17	0.29
(1,1024)	1:A:90:LYS:HG3	1:A:91:ASN:H	16	0.29
(1,943)	1:A:68:ASN:H	1:A:69:ALA:H	13	0.28
(1,746)	1:A:20:ASP:HA	1:A:21:ASN:H	5	0.28
(1,700)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:11:GLN:HG2	3	0.28
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	4	0.28
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	4	0.28
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	13	0.28
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	13	0.28
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	15	0.28
(1,2102)	1:A:73:TRP:HB3	1:A:81:PHE:HE2	11	0.28
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	10	0.28
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	3	0.28
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	3	0.28
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	3	0.28
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	5	0.28
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB2	1	0.28
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB3	1	0.28
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB2	1	0.28
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB3	1	0.28
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB2	1	0.28
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB3	1	0.28
(1,1199)	1:A:135:ALA:HA	1:A:136:GLU:H	11	0.28
(1,1134)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:121:GLU:HA	11	0.28
(1,933)	1:A:67:GLU:HG2	1:A:68:ASN:HA	4	0.27
(1,933)	1:A:67:GLU:HG3	1:A:68:ASN:HA	4	0.27
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	20	0.27
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	3	0.27
(1,1238)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:15:TYR:HE1	12	0.27
(1,818)	1:A:41:ILE:HG13	1:A:42:SER:H	13	0.26
(1,745)	1:A:19:THR:H	1:A:20:ASP:H	20	0.26
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	19	0.26
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	19	0.26
(1,2014)	1:A:60:TYR:HE1	1:A:123:SER:HB3	19	0.26
(1,1776)	1:A:28:GLU:HA	1:A:38:LEU:HG	12	0.26
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	1	0.26
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	2	0.26
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	1	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	16	0.26
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	14	0.25
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	14	0.25
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	14	0.25
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	15	0.25
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	6	0.25
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	6	0.25
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	6	0.25
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	2	0.25
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	2	0.25
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	2	0.25
(1,429)	1:A:84:ARG:HD2	1:A:84:ARG:HB2	1	0.24
(1,429)	1:A:84:ARG:HD3	1:A:84:ARG:HB2	1	0.24
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	16	0.24
(1,1634)	1:A:10:PHE:HD1	1:A:46:GLU:HA	8	0.24
(1,1532)	1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:ALA:HA	17	0.24
(1,1514)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HD1	9	0.24
(1,646)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	19	0.23
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	17	0.23
(1,1969)	1:A:59:SER:HA	1:A:103:VAL:HB	13	0.23
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	11	0.23
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	20	0.23
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	14	0.23
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	14	0.23
(1,1312)	1:A:39:MET:HE1	1:A:41:ILE:HB	13	0.23
(1,1312)	1:A:39:MET:HE2	1:A:41:ILE:HB	13	0.23
(1,1312)	1:A:39:MET:HE3	1:A:41:ILE:HB	13	0.23
(1,113)	1:A:22:LYS:H	1:A:22:LYS:HG2	14	0.23
(1,459)	1:A:90:LYS:HA	1:A:90:LYS:HG3	18	0.22
(1,1731)	1:A:22:LYS:H	1:A:121:GLU:HG3	2	0.22
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	20	0.22
(1,164)	1:A:37:HIS:HB2	1:A:37:HIS:HD2	19	0.22
(1,1442)	1:A:81:PHE:HD1	1:A:83:PRO:HA	5	0.22
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	15	0.22
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	15	0.22
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	15	0.22
(1,1239)	1:A:13:ASN:HB3	1:A:15:TYR:HE1	18	0.22
(1,1238)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:15:TYR:HE1	2	0.22
(1,100)	1:A:22:LYS:HA	1:A:22:LYS:HD2	16	0.22
(1,646)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	17	0.21
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	12	0.21
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	12	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	10	0.21
(1,2053)	1:A:62:LEU:HG	1:A:104:LEU:H	18	0.21
(1,1723)	1:A:19:THR:HG21	1:A:60:TYR:HE1	12	0.21
(1,1723)	1:A:19:THR:HG22	1:A:60:TYR:HE1	12	0.21
(1,1723)	1:A:19:THR:HG23	1:A:60:TYR:HE1	12	0.21
(1,1468)	1:A:90:LYS:HA	1:A:92:GLU:H	10	0.21
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	18	0.21
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	18	0.21
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	6	0.21
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	6	0.21
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	6	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB2	13	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB3	13	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB2	13	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB3	13	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB2	13	0.21
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB3	13	0.21
(1,13)	1:A:8:ARG:HA	1:A:8:ARG:HD2	13	0.21
(1,1234)	1:A:10:PHE:HB3	1:A:15:TYR:HE1	12	0.21
(1,851)	1:A:48:ASN:HB3	1:A:49:PHE:H	13	0.2
(1,301)	1:A:60:TYR:HA	1:A:60:TYR:HE1	9	0.2
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	19	0.2
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	19	0.2
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD21	1:A:102:VAL:HG21	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD21	1:A:102:VAL:HG22	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD21	1:A:102:VAL:HG23	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG21	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG22	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG23	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD23	1:A:102:VAL:HG21	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD23	1:A:102:VAL:HG22	19	0.2
(1,2045)	1:A:62:LEU:HD23	1:A:102:VAL:HG23	19	0.2
(1,1731)	1:A:22:LYS:H	1:A:121:GLU:HG3	13	0.2
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	20	0.2
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	20	0.2
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	20	0.2
(1,1410)	1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:TYR:HE2	6	0.2
(1,1225)	1:A:141:GLN:HB3	1:A:142:SER:HB2	14	0.2
(1,1134)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:121:GLU:HA	3	0.2
(1,1134)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:121:GLU:HA	5	0.2
(1,1023)	1:A:90:LYS:HG2	1:A:91:ASN:H	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD2	1:A:91:ASN:H	18	0.2
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD3	1:A:91:ASN:H	18	0.2
(1,97)	1:A:21:ASN:H	1:A:21:ASN:HB3	17	0.19
(1,945)	1:A:69:ALA:H	1:A:70:LYS:H	16	0.19
(1,784)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:ASN:H	2	0.19
(1,784)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:ASN:H	2	0.19
(1,487)	1:A:99:GLU:H	1:A:99:GLU:HG2	15	0.19
(1,416)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD22	11	0.19
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:81:PHE:HD2	12	0.19
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:81:PHE:HD2	12	0.19
(1,2084)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:81:PHE:HD2	12	0.19
(1,1959)	1:A:56:ARG:HG2	1:A:106:TYR:HE2	6	0.19
(1,1807)	1:A:37:HIS:HD2	1:A:77:ASP:HB3	6	0.19
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	14	0.19
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	17	0.19
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	17	0.19
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	17	0.19
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HE2	17	0.19
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HE2	17	0.19
(1,1414)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HE2	17	0.19
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	12	0.19
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	12	0.19
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	12	0.19
(1,97)	1:A:21:ASN:H	1:A:21:ASN:HB3	5	0.18
(1,895)	1:A:57:ARG:HG2	1:A:58:LEU:HA	4	0.18
(1,851)	1:A:48:ASN:HB3	1:A:49:PHE:H	14	0.18
(1,784)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:ASN:H	16	0.18
(1,784)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:ASN:H	16	0.18
(1,2150)	1:A:89:HIS:HE1	1:A:110:LYS:HA	1	0.18
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	15	0.18
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	15	0.18
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	15	0.18
(1,1527)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:120:PHE:HD2	16	0.18
(1,1467)	1:A:89:HIS:H	1:A:92:GLU:HB3	9	0.18
(1,1418)	1:A:68:ASN:HB2	1:A:70:LYS:HG3	13	0.18
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	5	0.18
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	5	0.18
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	5	0.18
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	7	0.18
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	7	0.18
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	7	0.18
(1,138)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HG2	12	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB2	14	0.18
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB1	1:A:48:ASN:HB3	14	0.18
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB2	14	0.18
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB2	1:A:48:ASN:HB3	14	0.18
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB2	14	0.18
(1,1340)	1:A:45:ALA:HB3	1:A:48:ASN:HB3	14	0.18
(1,1275)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HG3	12	0.18
(1,1225)	1:A:141:GLN:HB3	1:A:142:SER:HB2	1	0.18
(1,97)	1:A:21:ASN:H	1:A:21:ASN:HB3	20	0.17
(1,745)	1:A:19:THR:H	1:A:20:ASP:H	17	0.17
(1,635)	1:A:136:GLU:HG2	1:A:136:GLU:H	2	0.17
(1,635)	1:A:136:GLU:HG3	1:A:136:GLU:H	2	0.17
(1,55)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD22	14	0.17
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	3	0.17
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	3	0.17
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	14	0.17
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	14	0.17
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	18	0.17
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	18	0.17
(1,2058)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:76:VAL:HG21	19	0.17
(1,2058)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:76:VAL:HG22	19	0.17
(1,2058)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:76:VAL:HG23	19	0.17
(1,2020)	1:A:60:TYR:H	1:A:103:VAL:HB	4	0.17
(1,1969)	1:A:59:SER:HA	1:A:103:VAL:HB	14	0.17
(1,1871)	1:A:41:ILE:HD11	1:A:87:PHE:HE2	10	0.17
(1,1871)	1:A:41:ILE:HD12	1:A:87:PHE:HE2	10	0.17
(1,1871)	1:A:41:ILE:HD13	1:A:87:PHE:HE2	10	0.17
(1,1638)	1:A:10:PHE:HE2	1:A:49:PHE:HB3	12	0.17
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	11	0.17
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	11	0.17
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	11	0.17
(1,1430)	1:A:75:TRP:HB2	1:A:79:THR:HB	2	0.17
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	1	0.17
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	1	0.17
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	1	0.17
(1,1199)	1:A:135:ALA:HA	1:A:136:GLU:H	10	0.17
(1,1134)	1:A:120:PHE:HD1	1:A:121:GLU:HA	2	0.17
(1,1021)	1:A:90:LYS:HB3	1:A:91:ASN:H	15	0.17
(1,851)	1:A:48:ASN:HB3	1:A:49:PHE:H	1	0.16
(1,753)	1:A:22:LYS:HB2	1:A:23:THR:H	14	0.16
(1,488)	1:A:99:GLU:H	1:A:99:GLU:HG3	6	0.16
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	8	0.16
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD11	1:A:81:PHE:HD2	3	0.16
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD12	1:A:81:PHE:HD2	3	0.16
(1,2075)	1:A:64:LEU:HD13	1:A:81:PHE:HD2	3	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD11	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD12	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD13	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD11	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD12	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD13	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD11	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD12	4	0.16
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD13	4	0.16
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	8	0.16
(1,1515)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HE1	11	0.16
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	11	0.16
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	11	0.16
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	19	0.16
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	19	0.16
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	19	0.16
(1,138)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HG2	14	0.16
(1,1312)	1:A:39:MET:HE1	1:A:41:ILE:HB	8	0.16
(1,1312)	1:A:39:MET:HE2	1:A:41:ILE:HB	8	0.16
(1,1312)	1:A:39:MET:HE3	1:A:41:ILE:HB	8	0.16
(1,13)	1:A:8:ARG:HA	1:A:8:ARG:HD2	9	0.16
(1,1239)	1:A:13:ASN:HB3	1:A:15:TYR:HE1	8	0.16
(1,1234)	1:A:10:PHE:HB3	1:A:15:TYR:HE1	18	0.16
(1,1141)	1:A:121:GLU:HG3	1:A:122:ALA:H	2	0.16
(1,1031)	1:A:96:SER:HA	1:A:97:GLN:H	20	0.16
(1,1024)	1:A:90:LYS:HG3	1:A:91:ASN:H	17	0.16
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD2	1:A:91:ASN:H	16	0.16
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD3	1:A:91:ASN:H	16	0.16
(2,60)	1:A:75:TRP:H	1:A:79:THR:O	5	0.15
(2,20)	1:A:54:LEU:H	1:A:50:ILE:O	19	0.15
(1,784)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:ASN:H	10	0.15
(1,784)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:ASN:H	10	0.15
(1,663)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:141:GLN:H	12	0.15
(1,663)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:141:GLN:H	12	0.15
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	20	0.15
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	20	0.15
(1,2164)	1:A:101:CYS:H	1:A:116:VAL:H	13	0.15
(1,2157)	1:A:92:GLU:HB3	1:A:115:ASP:H	18	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2098)	1:A:69:ALA:HB1	1:A:97:GLN:HA	12	0.15
(1,2098)	1:A:69:ALA:HB2	1:A:97:GLN:HA	12	0.15
(1,2098)	1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:GLN:HA	12	0.15
(1,1958)	1:A:56:ARG:HG2	1:A:106:TYR:HD2	14	0.15
(1,1884)	1:A:43:THR:HA	1:A:85:ARG:HD3	14	0.15
(1,1829)	1:A:39:MET:HE1	1:A:46:GLU:HG3	3	0.15
(1,1829)	1:A:39:MET:HE2	1:A:46:GLU:HG3	3	0.15
(1,1829)	1:A:39:MET:HE3	1:A:46:GLU:HG3	3	0.15
(1,1824)	1:A:39:MET:HB2	1:A:125:ILE:HD11	12	0.15
(1,1824)	1:A:39:MET:HB2	1:A:125:ILE:HD12	12	0.15
(1,1824)	1:A:39:MET:HB2	1:A:125:ILE:HD13	12	0.15
(1,1824)	1:A:39:MET:HB3	1:A:125:ILE:HD11	12	0.15
(1,1824)	1:A:39:MET:HB3	1:A:125:ILE:HD12	12	0.15
(1,1824)	1:A:39:MET:HB3	1:A:125:ILE:HD13	12	0.15
(1,1808)	1:A:37:HIS:HE1	1:A:77:ASP:HA	6	0.15
(1,1776)	1:A:28:GLU:HA	1:A:38:LEU:HG	3	0.15
(1,1731)	1:A:22:LYS:H	1:A:121:GLU:HG3	12	0.15
(1,1731)	1:A:22:LYS:H	1:A:121:GLU:HG3	14	0.15
(1,1712)	1:A:19:THR:HA	1:A:60:TYR:HE1	3	0.15
(1,1440)	1:A:78:GLN:HE21	1:A:80:PRO:HG2	13	0.15
(1,13)	1:A:8:ARG:HA	1:A:8:ARG:HD2	17	0.15
(1,1274)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HD2	19	0.15
(1,1274)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HD3	19	0.15
(1,1256)	1:A:22:LYS:HA	1:A:27:SER:H	17	0.15
(1,1251)	1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:ASP:H	4	0.15
(1,113)	1:A:22:LYS:H	1:A:22:LYS:HG2	7	0.15
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG2	9	0.15
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG3	9	0.15
(1,1023)	1:A:90:LYS:HG2	1:A:91:ASN:H	16	0.15
(2,60)	1:A:75:TRP:H	1:A:79:THR:O	1	0.14
(2,60)	1:A:75:TRP:H	1:A:79:THR:O	16	0.14
(2,10)	1:A:47:GLN:H	1:A:43:THR:O	3	0.14
(1,892)	1:A:57:ARG:HB2	1:A:58:LEU:HD21	14	0.14
(1,892)	1:A:57:ARG:HB2	1:A:58:LEU:HD22	14	0.14
(1,892)	1:A:57:ARG:HB2	1:A:58:LEU:HD23	14	0.14
(1,790)	1:A:31:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	17	0.14
(1,747)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:ASN:H	19	0.14
(1,354)	1:A:70:LYS:H	1:A:70:LYS:HG2	6	0.14
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE2	1:A:14:CYS:H	4	0.14
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE3	1:A:14:CYS:H	4	0.14
(1,2122)	1:A:76:VAL:HG21	1:A:28:GLU:HG2	10	0.14
(1,2122)	1:A:76:VAL:HG21	1:A:28:GLU:HG3	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2122)	1:A:76:VAL:HG22	1:A:28:GLU:HG2	10	0.14
(1,2122)	1:A:76:VAL:HG22	1:A:28:GLU:HG3	10	0.14
(1,2122)	1:A:76:VAL:HG23	1:A:28:GLU:HG2	10	0.14
(1,2122)	1:A:76:VAL:HG23	1:A:28:GLU:HG3	10	0.14
(1,1807)	1:A:37:HIS:HD2	1:A:77:ASP:HB3	18	0.14
(1,1731)	1:A:22:LYS:H	1:A:121:GLU:HG3	3	0.14
(1,1618)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:15:TYR:HD1	7	0.14
(1,1573)	1:A:139:TYR:HA	1:A:142:SER:HB2	14	0.14
(1,1564)	1:A:137:ASN:HA	1:A:140:PHE:HA	11	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG21	1:A:132:THR:HG21	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG21	1:A:132:THR:HG22	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG21	1:A:132:THR:HG23	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG22	1:A:132:THR:HG21	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG22	1:A:132:THR:HG22	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG22	1:A:132:THR:HG23	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG23	1:A:132:THR:HG21	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG23	1:A:132:THR:HG22	3	0.14
(1,1540)	1:A:128:ILE:HG23	1:A:132:THR:HG23	3	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG21	5	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG22	5	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG23	5	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG21	7	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG22	7	0.14
(1,1509)	1:A:114:ASN:HB2	1:A:116:VAL:HG23	7	0.14
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	6	0.14
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	6	0.14
(1,13)	1:A:8:ARG:HA	1:A:8:ARG:HD2	8	0.14
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB1	4	0.14
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB2	4	0.14
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB3	4	0.14
(1,1247)	1:A:16:PHE:HZ	1:A:18:LEU:HD21	19	0.14
(1,1247)	1:A:16:PHE:HZ	1:A:18:LEU:HD22	19	0.14
(1,1247)	1:A:16:PHE:HZ	1:A:18:LEU:HD23	19	0.14
(1,1241)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:18:LEU:HD11	19	0.14
(1,1241)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:18:LEU:HD12	19	0.14
(1,1241)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:18:LEU:HD13	19	0.14
(1,1116)	1:A:116:VAL:HG21	1:A:117:PRO:HB2	12	0.14
(1,1116)	1:A:116:VAL:HG22	1:A:117:PRO:HB2	12	0.14
(1,1116)	1:A:116:VAL:HG23	1:A:117:PRO:HB2	12	0.14
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD2	1:A:91:ASN:H	15	0.14
(1,1022)	1:A:90:LYS:HD3	1:A:91:ASN:H	15	0.14
(1,1018)	1:A:89:HIS:HB2	1:A:90:LYS:H	19	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1018)	1:A:89:HIS:HB3	1:A:90:LYS:H	19	0.14
(2,68)	1:A:112:ALA:H	1:A:105:VAL:O	1	0.13
(2,20)	1:A:54:LEU:H	1:A:50:ILE:O	9	0.13
(2,20)	1:A:54:LEU:H	1:A:50:ILE:O	14	0.13
(2,18)	1:A:51:ILE:H	1:A:47:GLN:O	12	0.13
(2,18)	1:A:51:ILE:H	1:A:47:GLN:O	16	0.13
(1,957)	1:A:74:ARG:HB2	1:A:75:TRP:H	2	0.13
(1,848)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:48:ASN:H	14	0.13
(1,818)	1:A:41:ILE:HG13	1:A:42:SER:H	8	0.13
(1,753)	1:A:22:LYS:HB2	1:A:23:THR:H	3	0.13
(1,753)	1:A:22:LYS:HB2	1:A:23:THR:H	17	0.13
(1,55)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD22	18	0.13
(1,481)	1:A:97:GLN:HG2	1:A:97:GLN:H	18	0.13
(1,481)	1:A:97:GLN:HG3	1:A:97:GLN:H	18	0.13
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD2	9	0.13
(1,427)	1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	9	0.13
(1,394)	1:A:78:GLN:HG2	1:A:78:GLN:H	14	0.13
(1,394)	1:A:78:GLN:HG3	1:A:78:GLN:H	14	0.13
(1,346)	1:A:68:ASN:H	1:A:68:ASN:HD21	8	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG11	1:A:116:VAL:HG11	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG11	1:A:116:VAL:HG12	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG11	1:A:116:VAL:HG13	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG12	1:A:116:VAL:HG11	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG12	1:A:116:VAL:HG12	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG12	1:A:116:VAL:HG13	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG13	1:A:116:VAL:HG11	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG13	1:A:116:VAL:HG12	12	0.13
(1,2222)	1:A:105:VAL:HG13	1:A:116:VAL:HG13	12	0.13
(1,2150)	1:A:89:HIS:HE1	1:A:110:LYS:HA	3	0.13
(1,2150)	1:A:89:HIS:HE1	1:A:110:LYS:HA	4	0.13
(1,2145)	1:A:89:HIS:HD2	1:A:105:VAL:HG21	18	0.13
(1,2145)	1:A:89:HIS:HD2	1:A:105:VAL:HG22	18	0.13
(1,2145)	1:A:89:HIS:HD2	1:A:105:VAL:HG23	18	0.13
(1,2097)	1:A:67:GLU:HA	1:A:99:GLU:HG3	16	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD11	12	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD12	12	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD13	12	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD11	12	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD12	12	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD12	1:A:125:ILE:HD13	12	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD11	12	0.13
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD12	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2044)	1:A:62:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HD13	12	0.13
(1,1989)	1:A:59:SER:HB3	1:A:103:VAL:HG11	4	0.13
(1,1989)	1:A:59:SER:HB3	1:A:103:VAL:HG12	4	0.13
(1,1989)	1:A:59:SER:HB3	1:A:103:VAL:HG13	4	0.13
(1,1977)	1:A:59:SER:HB2	1:A:103:VAL:HB	4	0.13
(1,1966)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:111:TRP:HH2	4	0.13
(1,1966)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:111:TRP:HH2	4	0.13
(1,1966)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:111:TRP:HH2	4	0.13
(1,1958)	1:A:56:ARG:HG2	1:A:106:TYR:HD2	6	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD11	1:A:34:MET:HE1	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD11	1:A:34:MET:HE2	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD11	1:A:34:MET:HE3	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD12	1:A:34:MET:HE1	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD12	1:A:34:MET:HE2	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD12	1:A:34:MET:HE3	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD13	1:A:34:MET:HE1	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD13	1:A:34:MET:HE2	13	0.13
(1,1703)	1:A:18:LEU:HD13	1:A:34:MET:HE3	13	0.13
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB1	19	0.13
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB2	19	0.13
(1,1636)	1:A:10:PHE:HE1	1:A:45:ALA:HB3	19	0.13
(1,1610)	1:A:7:TRP:HZ2	1:A:34:MET:HG3	6	0.13
(1,1610)	1:A:7:TRP:HZ2	1:A:34:MET:HG3	7	0.13
(1,1564)	1:A:137:ASN:HA	1:A:140:PHE:HA	18	0.13
(1,1502)	1:A:108:GLN:H	1:A:110:LYS:H	8	0.13
(1,1467)	1:A:89:HIS:H	1:A:92:GLU:HB3	8	0.13
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:TYR:HD2	17	0.13
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:TYR:HD2	17	0.13
(1,1412)	1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:TYR:HD2	17	0.13
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	3	0.13
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	3	0.13
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	3	0.13
(1,1274)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HD2	4	0.13
(1,1274)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:ARG:HD3	4	0.13
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD21	9	0.13
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD22	9	0.13
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD23	9	0.13
(1,1141)	1:A:121:GLU:HG3	1:A:122:ALA:H	3	0.13
(1,1089)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:111:TRP:H	1	0.13
(1,1040)	1:A:97:GLN:HG2	1:A:98:GLY:H	13	0.13
(1,1040)	1:A:97:GLN:HG3	1:A:98:GLY:H	13	0.13
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG2	19	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG3	19	0.13
(2,68)	1:A:112:ALA:H	1:A:105:VAL:O	8	0.12
(2,20)	1:A:54:LEU:H	1:A:50:ILE:O	4	0.12
(2,10)	1:A:47:GLN:H	1:A:43:THR:O	1	0.12
(2,10)	1:A:47:GLN:H	1:A:43:THR:O	10	0.12
(1,753)	1:A:22:LYS:HB2	1:A:23:THR:H	7	0.12
(1,747)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:ASN:H	18	0.12
(1,55)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD22	17	0.12
(1,464)	1:A:90:LYS:H	1:A:90:LYS:HB3	2	0.12
(1,394)	1:A:78:GLN:HG2	1:A:78:GLN:H	8	0.12
(1,394)	1:A:78:GLN:HG3	1:A:78:GLN:H	8	0.12
(1,394)	1:A:78:GLN:HG2	1:A:78:GLN:H	10	0.12
(1,394)	1:A:78:GLN:HG3	1:A:78:GLN:H	10	0.12
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE2	1:A:14:CYS:H	2	0.12
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE3	1:A:14:CYS:H	2	0.12
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE2	1:A:14:CYS:H	11	0.12
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE3	1:A:14:CYS:H	11	0.12
(1,2150)	1:A:89:HIS:HE1	1:A:110:LYS:HA	7	0.12
(1,2150)	1:A:89:HIS:HE1	1:A:110:LYS:HA	12	0.12
(1,2054)	1:A:62:LEU:H	1:A:103:VAL:HG21	19	0.12
(1,2054)	1:A:62:LEU:H	1:A:103:VAL:HG22	19	0.12
(1,2054)	1:A:62:LEU:H	1:A:103:VAL:HG23	19	0.12
(1,1969)	1:A:59:SER:HA	1:A:103:VAL:HB	4	0.12
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD11	13	0.12
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD12	13	0.12
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD13	13	0.12
(1,1884)	1:A:43:THR:HA	1:A:85:ARG:HD3	6	0.12
(1,1856)	1:A:41:ILE:HD11	1:A:104:LEU:HB3	4	0.12
(1,1856)	1:A:41:ILE:HD12	1:A:104:LEU:HB3	4	0.12
(1,1856)	1:A:41:ILE:HD13	1:A:104:LEU:HB3	4	0.12
(1,1807)	1:A:37:HIS:HD2	1:A:77:ASP:HB3	1	0.12
(1,1621)	1:A:8:ARG:HD2	1:A:53:PHE:HZ	10	0.12
(1,1577)	1:A:2:VAL:HB	1:A:132:THR:HB	11	0.12
(1,1543)	1:A:129:PRO:HB3	1:A:131:THR:H	8	0.12
(1,1539)	1:A:128:ILE:HG21	1:A:131:THR:HB	11	0.12
(1,1539)	1:A:128:ILE:HG22	1:A:131:THR:HB	11	0.12
(1,1539)	1:A:128:ILE:HG23	1:A:131:THR:HB	11	0.12
(1,1482)	1:A:106:TYR:HD2	1:A:110:LYS:HA	14	0.12
(1,1419)	1:A:68:ASN:HB3	1:A:70:LYS:HG2	14	0.12
(1,1402)	1:A:55:ASP:HB2	1:A:58:LEU:H	6	0.12
(1,1401)	1:A:55:ASP:HB2	1:A:57:ARG:H	8	0.12
(1,1315)	1:A:39:MET:HG2	1:A:41:ILE:HD11	20	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1315)	1:A:39:MET:HG2	1:A:41:ILE:HD12	20	0.12
(1,1315)	1:A:39:MET:HG2	1:A:41:ILE:HD13	20	0.12
(1,1256)	1:A:22:LYS:HA	1:A:27:SER:H	14	0.12
(1,1251)	1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:ASP:H	12	0.12
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD21	18	0.12
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD22	18	0.12
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD23	18	0.12
(1,1141)	1:A:121:GLU:HG3	1:A:122:ALA:H	12	0.12
(1,113)	1:A:22:LYS:H	1:A:22:LYS:HG2	16	0.12
(1,1040)	1:A:97:GLN:HG2	1:A:98:GLY:H	5	0.12
(1,1040)	1:A:97:GLN:HG3	1:A:98:GLY:H	5	0.12
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG2	6	0.12
(1,1033)	1:A:96:SER:HB2	1:A:97:GLN:HG3	6	0.12
(2,20)	1:A:54:LEU:H	1:A:50:ILE:O	20	0.11
(2,10)	1:A:47:GLN:H	1:A:43:THR:O	16	0.11
(2,10)	1:A:47:GLN:H	1:A:43:THR:O	18	0.11
(1,792)	1:A:32:SER:HB3	1:A:33:GLY:H	19	0.11
(1,753)	1:A:22:LYS:HB2	1:A:23:THR:H	1	0.11
(1,690)	1:A:8:ARG:HD3	1:A:9:ALA:H	10	0.11
(1,683)	1:A:6:ASP:H	1:A:7:TRP:H	19	0.11
(1,662)	1:A:141:GLN:HA	1:A:141:GLN:HG2	5	0.11
(1,662)	1:A:141:GLN:HA	1:A:141:GLN:HG3	5	0.11
(1,55)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD22	4	0.11
(1,457)	1:A:90:LYS:HA	1:A:90:LYS:HE2	16	0.11
(1,457)	1:A:90:LYS:HA	1:A:90:LYS:HE3	16	0.11
(1,454)	1:A:88:TRP:H	1:A:88:TRP:HD1	7	0.11
(1,429)	1:A:84:ARG:HD2	1:A:84:ARG:HB2	10	0.11
(1,429)	1:A:84:ARG:HD3	1:A:84:ARG:HB2	10	0.11
(1,394)	1:A:78:GLN:HG2	1:A:78:GLN:H	19	0.11
(1,394)	1:A:78:GLN:HG3	1:A:78:GLN:H	19	0.11
(1,346)	1:A:68:ASN:H	1:A:68:ASN:HD21	3	0.11
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE2	1:A:14:CYS:H	1	0.11
(1,2243)	1:A:127:LYS:HE3	1:A:14:CYS:H	1	0.11
(1,2178)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:114:ASN:H	2	0.11
(1,2178)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:114:ASN:H	2	0.11
(1,2178)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:114:ASN:H	2	0.11
(1,2150)	1:A:89:HIS:HE1	1:A:110:LYS:HA	18	0.11
(1,2020)	1:A:60:TYR:H	1:A:103:VAL:HB	13	0.11
(1,1958)	1:A:56:ARG:HG2	1:A:106:TYR:HD2	17	0.11
(1,1955)	1:A:56:ARG:HD3	1:A:106:TYR:HE2	19	0.11
(1,1946)	1:A:56:ARG:HA	1:A:106:TYR:HD2	2	0.11
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD11	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD12	8	0.11
(1,1900)	1:A:47:GLN:HG3	1:A:62:LEU:HD13	8	0.11
(1,1680)	1:A:16:PHE:HE1	1:A:6:ASP:HB2	19	0.11
(1,1680)	1:A:16:PHE:HE1	1:A:6:ASP:HB3	19	0.11
(1,1610)	1:A:7:TRP:HZ2	1:A:34:MET:HG3	16	0.11
(1,1580)	1:A:2:VAL:HG11	1:A:131:THR:H	7	0.11
(1,1580)	1:A:2:VAL:HG12	1:A:131:THR:H	7	0.11
(1,1580)	1:A:2:VAL:HG13	1:A:131:THR:H	7	0.11
(1,1580)	1:A:2:VAL:HG21	1:A:131:THR:H	7	0.11
(1,1580)	1:A:2:VAL:HG22	1:A:131:THR:H	7	0.11
(1,1580)	1:A:2:VAL:HG23	1:A:131:THR:H	7	0.11
(1,1573)	1:A:139:TYR:HA	1:A:142:SER:HB2	1	0.11
(1,1549)	1:A:129:PRO:HG3	1:A:131:THR:HG21	20	0.11
(1,1549)	1:A:129:PRO:HG3	1:A:131:THR:HG22	20	0.11
(1,1549)	1:A:129:PRO:HG3	1:A:131:THR:HG23	20	0.11
(1,1513)	1:A:116:VAL:HB	1:A:120:PHE:HB3	7	0.11
(1,1502)	1:A:108:GLN:H	1:A:110:LYS:H	13	0.11
(1,1451)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:85:ARG:HB2	17	0.11
(1,1440)	1:A:78:GLN:HE21	1:A:80:PRO:HG2	16	0.11
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	1	0.11
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	1	0.11
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	4	0.11
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	4	0.11
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD2	1:A:65:ARG:HD3	12	0.11
(1,1423)	1:A:70:LYS:HD3	1:A:65:ARG:HD3	12	0.11
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	16	0.11
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	16	0.11
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	16	0.11
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD11	1:A:60:TYR:HE2	20	0.11
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:TYR:HE2	20	0.11
(1,1411)	1:A:58:LEU:HD13	1:A:60:TYR:HE2	20	0.11
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB1	8	0.11
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB2	8	0.11
(1,1294)	1:A:31:CYS:H	1:A:36:ALA:HB3	8	0.11
(1,1256)	1:A:22:LYS:HA	1:A:27:SER:H	7	0.11
(1,1239)	1:A:13:ASN:HB3	1:A:15:TYR:HE1	15	0.11
(1,1234)	1:A:10:PHE:HB3	1:A:15:TYR:HE1	3	0.11
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD21	3	0.11
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD22	3	0.11
(1,1183)	1:A:132:THR:HA	1:A:133:LEU:HD23	3	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:103:VAL:HG11	4	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:103:VAL:HG12	4	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:103:VAL:HG13	4	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:103:VAL:HG11	4	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:103:VAL:HG12	4	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:103:VAL:HG13	4	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:VAL:HG11	4	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:VAL:HG12	4	0.11
(1,1051)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:VAL:HG13	4	0.11
(1,1031)	1:A:96:SER:HA	1:A:97:GLN:H	15	0.11
(1,1023)	1:A:90:LYS:HG2	1:A:91:ASN:H	17	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

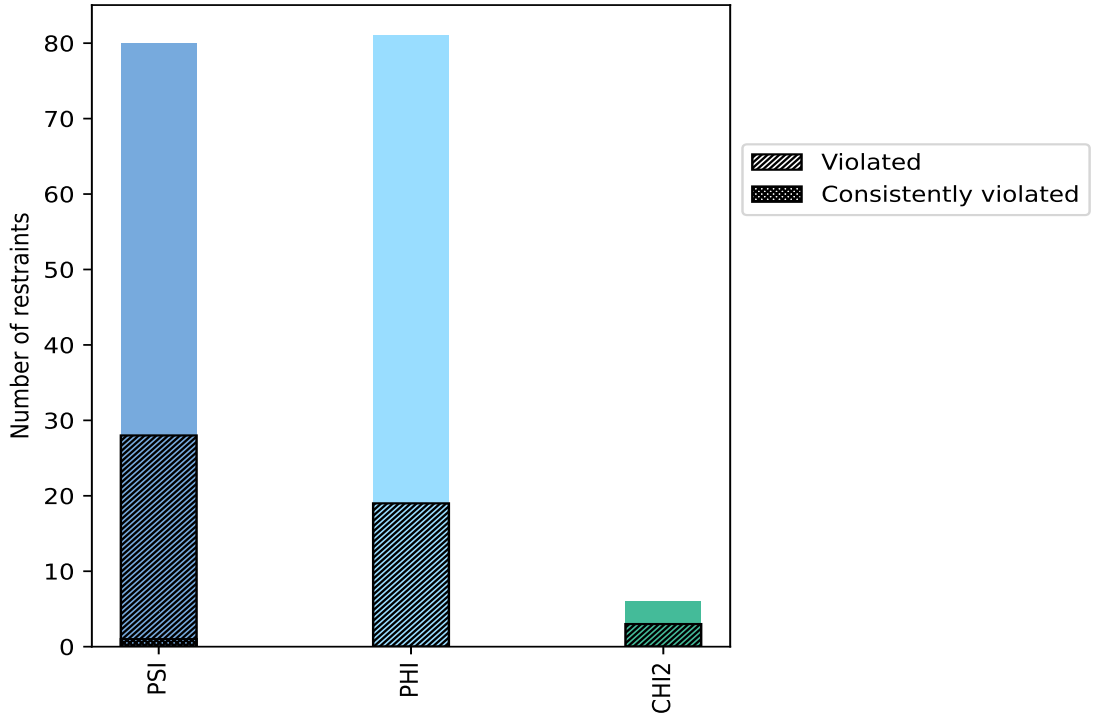
10.1 Summary of dihedral-angle violations (i)

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	80	47.9	28	35.0	16.8	1	1.2	0.6
PHI	81	48.5	19	23.5	11.4	0	0.0	0.0
CHI2	6	3.6	3	50.0	1.8	0	0.0	0.0
Total	167	100.0	50	29.9	29.9	1	0.6	0.6

[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)



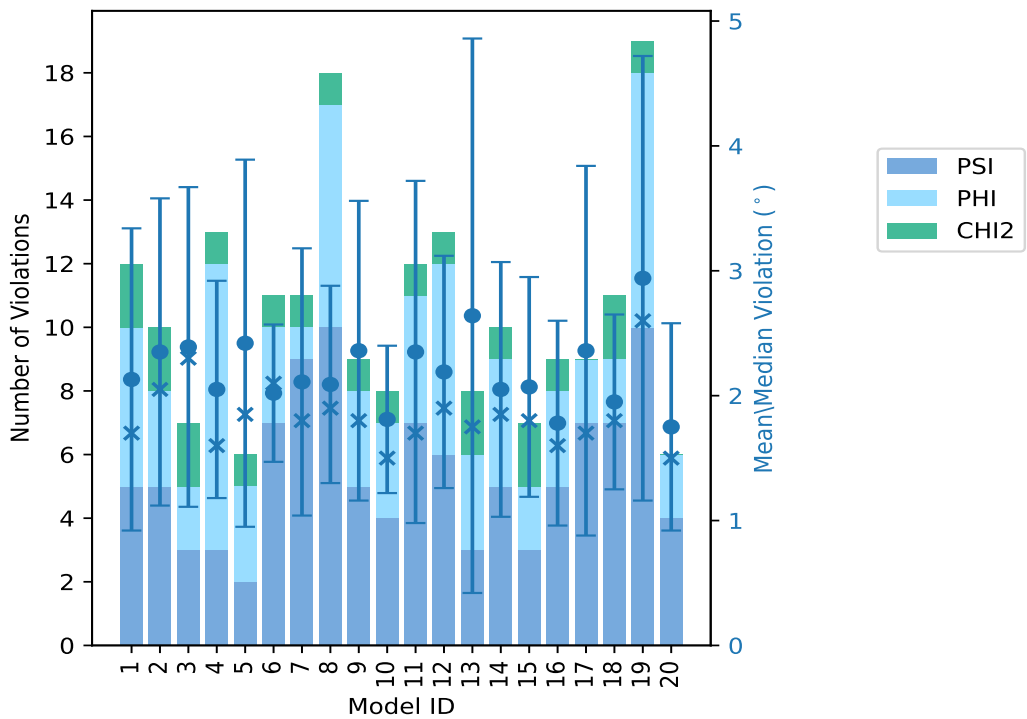
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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	CHI2	Total				
1	5	5	2	12	2.13	5.6	1.21	1.7
2	5	3	2	10	2.35	5.8	1.23	2.05
3	3	2	2	7	2.39	5.0	1.28	2.3
4	3	9	1	13	2.05	4.4	0.87	1.6
5	2	3	1	6	2.42	5.6	1.47	1.85
6	7	3	1	11	2.02	2.8	0.55	2.1
7	9	1	1	11	2.11	4.2	1.07	1.8
8	10	7	1	18	2.09	3.8	0.79	1.9
9	5	3	1	9	2.36	5.1	1.2	1.8
10	4	3	1	8	1.81	2.9	0.59	1.5
11	7	4	1	12	2.35	5.1	1.37	1.7
12	6	6	1	13	2.19	4.5	0.93	1.9
13	3	3	2	8	2.64	8.0	2.22	1.75
14	5	4	1	10	2.05	4.9	1.02	1.85
15	3	2	2	7	2.07	3.6	0.88	1.8
16	5	3	1	9	1.78	3.9	0.82	1.6
17	7	2	0	9	2.36	6.3	1.48	1.7
18	7	2	2	11	1.95	3.4	0.7	1.8
19	10	8	1	19	2.94	7.0	1.78	2.6
20	4	2	0	6	1.75	3.5	0.83	1.5

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	CHI2	Total	Count[1]	%
10	6	1	17	1	5.0
4	3	0	7	2	10.0
2	1	0	3	3	15.0
4	1	0	5	4	20.0
0	3	0	3	5	25.0
2	1	1	4	6	30.0
3	2	0	5	7	35.0
1	0	0	1	8	40.0
1	0	0	1	9	45.0
0	1	0	1	10	50.0
0	1	0	1	11	55.0

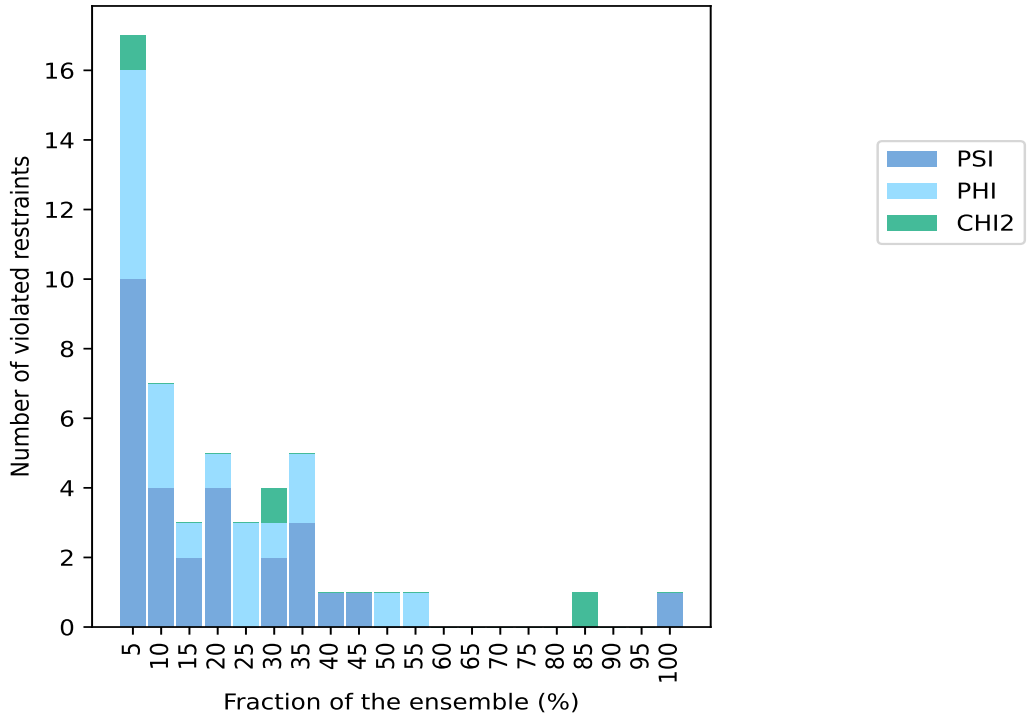
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints				Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	CHI2	Total	Count[1]	%
0	0	0	0	12	60.0
0	0	0	0	13	65.0
0	0	0	0	14	70.0
0	0	0	0	15	75.0
0	0	0	0	16	80.0
0	0	1	1	17	85.0
0	0	0	0	18	90.0
0	0	0	0	19	95.0
1	0	0	1	20	100.0

[1] Number of models with violations

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

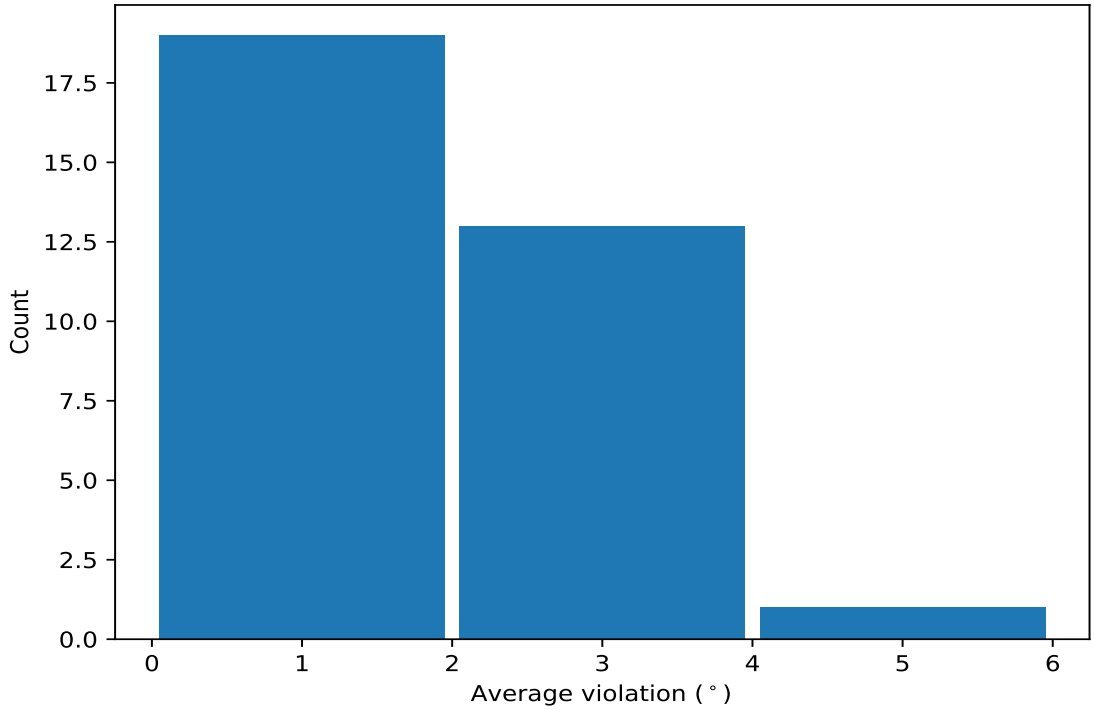


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble (i)

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
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	20	4.32	1.4	4.3
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	17	2.54	1.12	2.4
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	11	2.07	0.62	2.0
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	10	1.43	0.2	1.45
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	9	2.0	0.84	1.8
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	8	1.84	0.56	1.7
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	7	2.27	0.65	2.6
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	7	2.0	0.92	1.6
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	7	1.83	0.46	1.7
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	7	1.69	0.51	1.6
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	7	1.49	0.24	1.5
(1,2)	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	6	2.98	1.96	2.4
(1,164)	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:CB	1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:CD	6	2.95	1.16	2.75
(1,21)	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	6	1.67	0.3	1.75
(1,24)	1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CA	1:A:18:LEU:C	1:A:19:THR:N	6	1.47	0.36	1.35
(1,145)	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASN:N	1:A:134:ASN:CA	1:A:134:ASN:C	5	2.38	0.81	1.9
(1,158)	1:A:140:PHE:C	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	5	2.04	0.53	1.9
(1,105)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CA	1:A:104:LEU:C	5	1.66	0.59	1.3
(1,140)	1:A:129:PRO:N	1:A:129:PRO:CA	1:A:129:PRO:C	1:A:130:GLY:N	4	1.75	0.55	1.5
(1,45)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	4	1.72	0.16	1.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

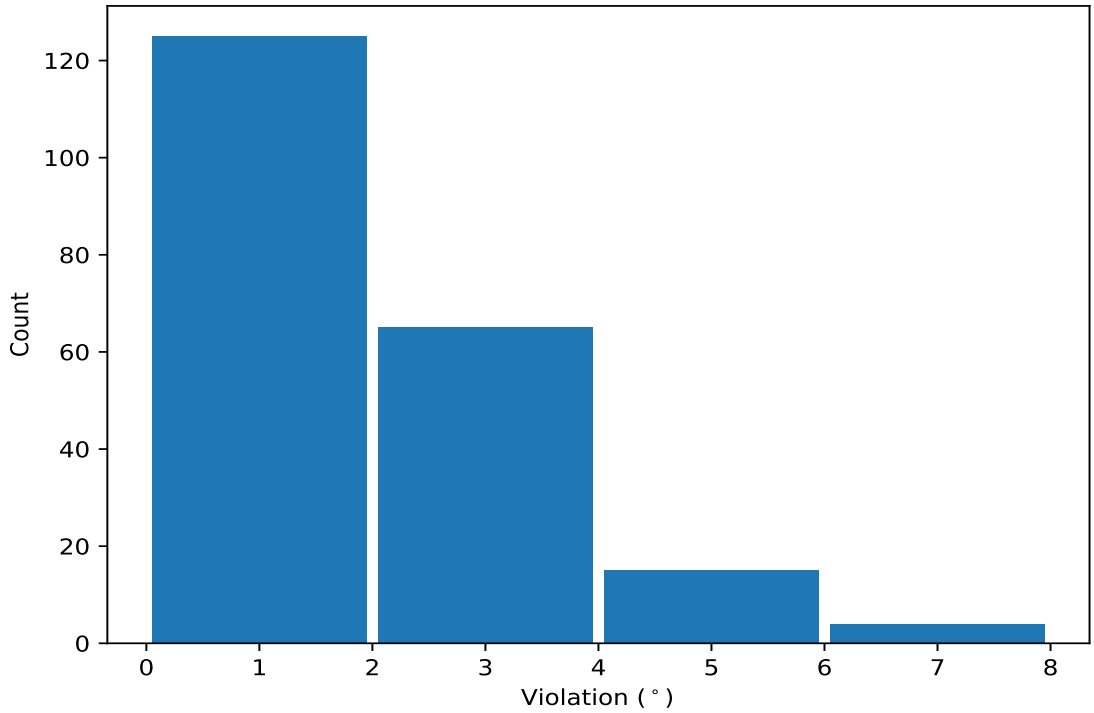
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models[1]	Mean	SD[2]	Median
(1,159)	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	4	1.6	0.14	1.6
(1,86)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLU:N	4	1.45	0.21	1.45
(1,122)	1:A:116:VAL:N	1:A:116:VAL:CA	1:A:116:VAL:C	1:A:117:PRO:N	4	1.43	0.29	1.4
(1,6)	1:A:4:PRO:N	1:A:4:PRO:CA	1:A:4:PRO:C	1:A:5:ILE:N	3	3.07	1.81	2.1
(1,150)	1:A:136:GLU:C	1:A:137:ASN:N	1:A:137:ASN:CA	1:A:137:ASN:C	3	2.43	1.03	2.2
(1,126)	1:A:121:GLU:N	1:A:121:GLU:CA	1:A:121:GLU:C	1:A:122:ALA:N	3	1.37	0.25	1.3
(1,92)	1:A:75:TRP:N	1:A:75:TRP:CA	1:A:75:TRP:C	1:A:76:VAL:N	2	2.35	0.55	2.35
(1,149)	1:A:136:GLU:N	1:A:136:GLU:CA	1:A:136:GLU:C	1:A:137:ASN:N	2	2.05	0.95	2.05
(1,128)	1:A:122:ALA:N	1:A:122:ALA:CA	1:A:122:ALA:C	1:A:123:SER:N	2	1.6	0.2	1.6
(1,81)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CA	1:A:64:LEU:C	2	1.55	0.35	1.55
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	2	1.5	0.1	1.5
(1,155)	1:A:139:TYR:N	1:A:139:TYR:CA	1:A:139:TYR:C	1:A:140:PHE:N	2	1.45	0.25	1.45
(1,83)	1:A:64:LEU:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	2	1.3	0.1	1.3

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints (i)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations (i)

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 (°)
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	13	8.0
(1,2)	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	19	7.0
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	19	6.5
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	17	6.3
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	2	5.8
(1,6)	1:A:4:PRO:N	1:A:4:PRO:CA	1:A:4:PRO:C	1:A:5:ILE:N	19	5.6
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	5	5.6
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	1	5.6
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	9	5.1
(1,164)	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:CB	1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:CD	11	5.1
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	3	5.0
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	14	4.9
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	11	4.5
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	12	4.5
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	4	4.4
(1,82)	1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CA	1:A:64:LEU:C	1:A:65:ARG:N	19	4.3
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	7	4.2
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	7	4.2
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	13	4.1
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	16	3.9
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	19	3.9
(1,145)	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASN:N	1:A:134:ASN:CA	1:A:134:ASN:C	11	3.9
(1,150)	1:A:136:GLU:C	1:A:137:ASN:N	1:A:137:ASN:CA	1:A:137:ASN:C	8	3.8
(1,84)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:ASP:N	19	3.7
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	15	3.6
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	20	3.5
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	19	3.5
(1,2)	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	9	3.4
(1,164)	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:CB	1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:CD	18	3.4
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	8	3.4
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	3	3.3
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	1	3.2
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	11	3.2
(1,164)	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:CB	1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:CD	15	3.2
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	12	3.1
(1,2)	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	17	3.0
(1,158)	1:A:140:PHE:C	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	9	3.0
(1,149)	1:A:136:GLU:N	1:A:136:GLU:CA	1:A:136:GLU:C	1:A:137:ASN:N	8	3.0
(1,92)	1:A:75:TRP:N	1:A:75:TRP:CA	1:A:75:TRP:C	1:A:76:VAL:N	2	2.9
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	10	2.9
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	4	2.9
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	8	2.8
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	8	2.8
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	8	2.8
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	12	2.8
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	19	2.8
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	6	2.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	18	2.8
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	12	2.8
(1,123)	1:A:116:VAL:C	1:A:117:PRO:N	1:A:117:PRO:CA	1:A:117:PRO:C	12	2.8
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	19	2.8
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	1	2.7
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	7	2.7
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	10	2.7
(1,140)	1:A:129:PRO:N	1:A:129:PRO:CA	1:A:129:PRO:C	1:A:130:GLY:N	6	2.7
(1,105)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CA	1:A:104:LEU:C	18	2.7
(1,50)	1:A:39:MET:N	1:A:39:MET:CA	1:A:39:MET:C	1:A:40:THR:N	6	2.6
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	19	2.6
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	4	2.5
(1,5)	1:A:3:CYS:C	1:A:4:PRO:N	1:A:4:PRO:CA	1:A:4:PRO:C	14	2.5
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	4	2.5
(1,145)	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASN:N	1:A:134:ASN:CA	1:A:134:ASN:C	4	2.5
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	6	2.4
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	17	2.4
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	5	2.4
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	3	2.3
(1,164)	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:CB	1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:CD	2	2.3
(1,164)	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:CB	1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:CD	3	2.3
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	2	2.3
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	6	2.2
(1,24)	1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CA	1:A:18:LEU:C	1:A:19:THR:N	2	2.2
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	9	2.2
(1,150)	1:A:136:GLU:C	1:A:137:ASN:N	1:A:137:ASN:CA	1:A:137:ASN:C	1	2.2
(1,6)	1:A:4:PRO:N	1:A:4:PRO:CA	1:A:4:PRO:C	1:A:5:ILE:N	6	2.1
(1,44)	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1:A:32:SER:N	18	2.1
(1,165)	1:A:70:LYS:CA	1:A:70:LYS:CB	1:A:70:LYS:CG	1:A:70:LYS:CD	13	2.1
(1,158)	1:A:140:PHE:C	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	16	2.1
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	5	2.1
(1,45)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	8	2.0
(1,21)	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	12	2.0
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	14	2.0
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	7	2.0
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	16	2.0
(1,118)	1:A:114:ASN:N	1:A:114:ASN:CA	1:A:114:ASN:C	1:A:115:ASP:N	1	2.0
(1,81)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CA	1:A:64:LEU:C	15	1.9
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	4	1.9
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	18	1.9
(1,4)	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	1:A:4:PRO:N	14	1.9
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	8	1.9
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	14	1.9
(1,21)	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	8	1.9
(1,158)	1:A:140:PHE:C	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	2	1.9
(1,145)	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASN:N	1:A:134:ASN:CA	1:A:134:ASN:C	8	1.9
(1,145)	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASN:N	1:A:134:ASN:CA	1:A:134:ASN:C	12	1.9
(1,105)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CA	1:A:104:LEU:C	13	1.9
(1,92)	1:A:75:TRP:N	1:A:75:TRP:CA	1:A:75:TRP:C	1:A:76:VAL:N	15	1.8
(1,88)	1:A:73:TRP:N	1:A:73:TRP:CA	1:A:73:TRP:C	1:A:74:ARG:N	6	1.8
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	8	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	9	1.8
(1,21)	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	11	1.8
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	17	1.8
(1,2)	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	7	1.8
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	12	1.8
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	10	1.8
(1,159)	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	7	1.8
(1,158)	1:A:140:PHE:C	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	19	1.8
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	1	1.8
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	14	1.8
(1,128)	1:A:122:ALA:N	1:A:122:ALA:CA	1:A:122:ALA:C	1:A:123:SER:N	20	1.8
(1,122)	1:A:116:VAL:N	1:A:116:VAL:CA	1:A:116:VAL:C	1:A:117:PRO:N	8	1.8
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	18	1.8
(1,86)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLU:N	12	1.7
(1,45)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	11	1.7
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	20	1.7
(1,21)	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	19	1.7
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	2	1.7
(1,155)	1:A:139:TYR:N	1:A:139:TYR:CA	1:A:139:TYR:C	1:A:140:PHE:N	19	1.7
(1,145)	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASN:N	1:A:134:ASN:CA	1:A:134:ASN:C	17	1.7
(1,126)	1:A:121:GLU:N	1:A:121:GLU:CA	1:A:121:GLU:C	1:A:122:ALA:N	8	1.7
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	11	1.7
(1,86)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLU:N	19	1.6
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	6	1.6
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	16	1.6
(1,45)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	4	1.6
(1,45)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	5	1.6
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	2	1.6
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	9	1.6
(1,24)	1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CA	1:A:18:LEU:C	1:A:19:THR:N	16	1.6
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	7	1.6
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	1	1.6
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	19	1.6
(1,159)	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	13	1.6
(1,159)	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	17	1.6
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	17	1.6
(1,122)	1:A:116:VAL:N	1:A:116:VAL:CA	1:A:116:VAL:C	1:A:117:PRO:N	18	1.6
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	12	1.6
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	4	1.6
(1,6)	1:A:4:PRO:N	1:A:4:PRO:CA	1:A:4:PRO:C	1:A:5:ILE:N	2	1.5
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	10	1.5
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	6	1.5
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	4	1.5
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	10	1.5
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	11	1.5
(1,21)	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	14	1.5
(1,2)	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	1	1.5
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	4	1.5
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	14	1.5
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	10	1.5
(1,140)	1:A:129:PRO:N	1:A:129:PRO:CA	1:A:129:PRO:C	1:A:130:GLY:N	3	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,140)	1:A:129:PRO:N	1:A:129:PRO:CA	1:A:129:PRO:C	1:A:130:GLY:N	17	1.5
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	9	1.5
(1,83)	1:A:64:LEU:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	19	1.4
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	9	1.4
(1,24)	1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CA	1:A:18:LEU:C	1:A:19:THR:N	18	1.4
(1,164)	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:CB	1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:CD	1	1.4
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	5	1.4
(1,159)	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	15	1.4
(1,158)	1:A:140:PHE:C	1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:CA	1:A:141:GLN:C	5	1.4
(1,128)	1:A:122:ALA:N	1:A:122:ALA:CA	1:A:122:ALA:C	1:A:123:SER:N	14	1.4
(1,106)	1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CA	1:A:104:LEU:C	1:A:105:VAL:N	10	1.4
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	15	1.4
(1,86)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLU:N	16	1.3
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	1	1.3
(1,46)	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1:A:37:HIS:N	11	1.3
(1,38)	1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CA	1:A:28:GLU:C	1:A:29:ARG:N	20	1.3
(1,24)	1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CA	1:A:18:LEU:C	1:A:19:THR:N	7	1.3
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	18	1.3
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	16	1.3
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	2	1.3
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	6	1.3
(1,150)	1:A:136:GLU:C	1:A:137:ASN:N	1:A:137:ASN:CA	1:A:137:ASN:C	4	1.3
(1,140)	1:A:129:PRO:N	1:A:129:PRO:CA	1:A:129:PRO:C	1:A:130:GLY:N	4	1.3
(1,126)	1:A:121:GLU:N	1:A:121:GLU:CA	1:A:121:GLU:C	1:A:122:ALA:N	7	1.3
(1,120)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:VAL:N	17	1.3
(1,105)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CA	1:A:104:LEU:C	8	1.3
(1,105)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CA	1:A:104:LEU:C	11	1.3
(1,93)	1:A:78:GLN:C	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	3	1.2
(1,86)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLU:N	8	1.2
(1,83)	1:A:64:LEU:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	13	1.2
(1,81)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CA	1:A:64:LEU:C	9	1.2
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	12	1.2
(1,65)	1:A:48:ASN:C	1:A:49:PHE:N	1:A:49:PHE:CA	1:A:49:PHE:C	19	1.2
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	18	1.2
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	1	1.2
(1,43)	1:A:30:ASN:C	1:A:31:CYS:N	1:A:31:CYS:CA	1:A:31:CYS:C	6	1.2
(1,24)	1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CA	1:A:18:LEU:C	1:A:19:THR:N	8	1.2
(1,2)	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1:A:3:CYS:N	18	1.2
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	8	1.2
(1,163)	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:CB	1:A:44:GLU:CG	1:A:44:GLU:CD	15	1.2
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	12	1.2
(1,155)	1:A:139:TYR:N	1:A:139:TYR:CA	1:A:139:TYR:C	1:A:140:PHE:N	8	1.2
(1,122)	1:A:116:VAL:N	1:A:116:VAL:CA	1:A:116:VAL:C	1:A:117:PRO:N	10	1.2
(1,10)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:PHE:N	7	1.2
(1,7)	1:A:7:TRP:C	1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:C	19	1.1
(1,48)	1:A:37:HIS:N	1:A:37:HIS:CA	1:A:37:HIS:C	1:A:38:LEU:N	13	1.1
(1,24)	1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CA	1:A:18:LEU:C	1:A:19:THR:N	11	1.1
(1,21)	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	4	1.1
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	3	1.1
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	14	1.1
(1,20)	1:A:16:PHE:N	1:A:16:PHE:CA	1:A:16:PHE:C	1:A:17:PRO:N	20	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,160)	1:A:141:GLN:C	1:A:142:SER:N	1:A:142:SER:CA	1:A:142:SER:C	16	1.1
(1,16)	1:A:14:CYS:N	1:A:14:CYS:CA	1:A:14:CYS:C	1:A:15:TYR:N	16	1.1
(1,149)	1:A:136:GLU:N	1:A:136:GLU:CA	1:A:136:GLU:C	1:A:137:ASN:N	7	1.1
(1,147)	1:A:134:ASN:C	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	13	1.1
(1,133)	1:A:125:ILE:C	1:A:126:CYS:N	1:A:126:CYS:CA	1:A:126:CYS:C	19	1.1
(1,126)	1:A:121:GLU:N	1:A:121:GLU:CA	1:A:121:GLU:C	1:A:122:ALA:N	11	1.1
(1,124)	1:A:117:PRO:N	1:A:117:PRO:CA	1:A:117:PRO:C	1:A:118:CYS:N	12	1.1
(1,122)	1:A:116:VAL:N	1:A:116:VAL:CA	1:A:116:VAL:C	1:A:117:PRO:N	1	1.1
(1,105)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CA	1:A:104:LEU:C	20	1.1