

pdb_id	PDB_Year	PDB_Vol_asym	SFC_res_optical	SFC_res_max_used	SFC_res_opt_diff	SFC_res_effective	SFC_sf_res_low	SFC_sf_res_high	PDB_Resolution	SFC_rfact_all_refl	SFC_correlation	SFC_rfact_2sigma	SFC_correlation_2sigm	PDB_RWork	SFC_rwork_recomp	SFC_rwork_recomp_di	PDB_RFfree	SFC_rfree_recomp	SFC_rfree_recomp_diff	PDB_Rdiff
15c8	1998	157144	1.86	2.50	0.033	1.95	51.15	2.45	2.50	0.208	0.9148	0.197	0.9094	0.190	0.194	0.004	0.251	0.244	-0.007	0.061
1a8v	1998	28417	1.59	2.00	0.003	1.75	19.28	2.00	2.00	0.277	0.8981	0.277	0.8988	0.193	0.306	0.113	0.261	0.275	0.014	0.068
1j78	2001	159990	1.82	2.31	-0.041	2.05	29.38	2.31	2.31	0.256	0.9093	0.250	0.9051	0.220	0.249	0.029	0.252	0.283	0.031	0.032
1sbm	2004	103008	1.38	1.69	0.027	1.58	22.58	1.69	1.69	0.188	0.9569	0.431	0.7844	0.181	0.432	0.251	0.200	0.405	0.205	0.019
1tzb	2004	71214	1.13	1.16	-0.041	1.38	35.95	1.16	1.16	0.195	0.9616	0.196	0.9601	0.149	0.195	0.046	0.165	0.205	0.040	0.016
1w48	2004	92607	1.75	2.30	0.023	1.87	19.97	2.30	2.30	0.183	0.9477	0.187	0.9385	0.164	0.184	0.020	0.218	0.241	0.023	0.054
1y8e	2004	152089	1.82	2.20	-0.107	2.07	29.88	2.20	2.20	0.204	0.9329	0.198	0.9415	0.195	0.193	-0.002	0.215	0.239	0.024	0.020
2a01	2005	177061	1.88	2.40	-0.047	2.06	29.57	2.35	2.40	0.282	0.8528	0.296	0.7967	0.228	0.295	0.067	0.249	0.318	0.069	0.021
2akf	2005	7369	1.11	1.20	0.003	1.36	18.92	1.20	1.20	0.220	0.9446	0.222	0.9422	0.160	0.222	0.062	0.196	0.227	0.031	0.036
2f80	2005	28929	1.27	1.45	-0.007	1.52	10.00	1.45	1.45	0.196	0.9555	0.191	0.9532	0.149	0.190	0.041	0.218	0.814	0.596	0.069
2q23	2007	2625935	2.29	3.20	0.023	2.31	49.04	3.20	3.20	0.464	0.5116	0.459	0.5472	0.280	0.459	0.179	0.282	0.461	0.179	0.002
2qgh	2007	121719	1.72	2.30	0.053	1.81	19.00	2.30	2.30	0.235	0.8974	0.381	0.4899	0.206	0.371	0.165	0.267	0.536	0.269	0.061
2qz5	2007	39000	1.82	2.60	0.133	1.87	32.18	1.73	2.60	0.263	0.8494	0.267	0.832	0.225	0.266	0.041	0.289	0.929	0.640	0.064
2uwf	2007	88191	1.68	2.10	-0.027	1.90	25.29	2.10	2.10	0.253	0.9048	0.265	0.8755	0.185	0.262	0.077	0.241	0.327	0.086	0.056
2xi5	2010	3931820	1.72	2.20	-0.007	1.88	47.16	2.20	2.20	0.229	0.9124	0.237	0.8905	0.192	0.236	0.044	0.224	0.262	0.038	0.032
2y8v	2011	106836	1.54	1.99	0.047	1.71	24.85	1.99	1.99	0.196	0.9309	0.199	0.9256	0.169	0.199	0.030	0.213	0.239	0.026	0.044
2z2q	2007	2667040	2.02	2.70	-0.007	2.21	46.91	2.70	2.70	0.527	0.4607	0.520	0.4925	0.256	0.520	0.264	0.264	0.526	0.262	0.008
2zhi	2008	76024	1.31	1.58	0.031	1.52	9.99	1.58	1.58	0.187	0.9508	0.185	0.9479	0.185	0.185	0.000	0.228	0.912	0.684	0.043
3ai3	2010	59110	1.43	1.80	0.043	1.61	19.69	1.80	1.80	0.190	0.9517	0.193	0.947	0.212	0.191	-0.021	0.249	0.227	-0.022	0.037
3cji	2008	14252809	1.82	2.30	-0.047	2.05	88.56	2.30	2.30	0.519	0.3755	0.524	0.4123	0.258	0.524	0.266	0.260	0.520	0.260	0.002
3e3z	2008	46066	1.42	1.70	-0.007	1.62	34.34	1.70	1.70	0.557	0.5109	0.556	0.5226	0.149	0.556	0.407	0.188	0.561	0.373	0.039
3fk0	2008	106019	1.34	1.70	0.073	1.51	19.63	1.70	1.70	0.164	0.9554	0.168	0.9493	0.163	0.167	0.004	0.203	0.204	0.001	0.040
3iqv	2009	71901	1.13	1.20	-0.017	1.37	41.65	1.20	1.20	0.542	0.6092	0.543	0.6139	0.123	0.543	0.420	0.153	0.541	0.388	0.030
3k5d	2009	138137	2.11	2.90	0.023	2.15	80.04	2.90	2.90	0.244	0.8817	0.253	0.8561	0.202	0.250	0.048	0.238	0.280	0.042	0.036
3kh2	2009	79204	2.01	2.71	0.009	2.10	37.39	2.70	2.71	0.295	0.8369	0.297	0.843	0.217	0.295	0.078	0.267	0.334	0.067	0.050
3n7x	2010	129546	1.81	2.51	0.083	1.92	49.98	2.51	2.50	0.546	0.2668	0.544	0.2729	0.278	0.545	0.267	0.285	0.541	0.256	0.007

pdb_id	SFC_rdiff_recomp	SFC_rdiff_recomp_diff	PDB_Rfrac	SFC_rfrac_recomp	SFC_rfrac_recomp_diff	B_mean_u_all	B_mean_u_amino	B_mean_u_main	B_mean_u_side	B_mean_u_water	B_stdev_u_all	B_stdev_u_amino	B_stdev_u_main	B_stdev_u_side	B_stdev_u_water	B_CV_u_all	B_CV_u_amino
15c8	0.050	-0.0110	0.3211	0.2577	-0.0633	0.6493	0.6498	0.6398	0.6608	0.6334	0.2092	0.2111	0.1984	0.2239	0.1220	0.3222	0.3249
1a8v	-0.031	-0.0990	0.3523	-0.1013	-0.4536	0.6245	0.6210	0.5808	0.6628	0.7071	0.1446	0.1443	0.1166	0.1580	0.1061	0.2315	0.2324
1j78	0.034	0.0020	0.1455	0.1365	-0.0089	0.8570	0.8558	0.8469	0.8656	0.8085	0.1759	0.1759	0.1784	0.1725	0.0866	0.2053	0.2055
1sbm	-0.027	-0.0460	0.1050	-0.0625	-0.1675	0.5057	0.4655	0.4618	0.4691	0.6714	0.1073	0.0495	0.0481	0.0506	0.1217	0.2122	0.1063
1tzb	0.010	-0.0060	0.1074	0.0513	-0.0561	0.4122	0.3884	0.3797	0.3979	0.5811	0.0929	0.0594	0.0560	0.0615	0.1128	0.2254	0.1529
1w48	0.057	0.0030	0.3293	0.3098	-0.0195	0.6805	0.6711	0.6465	0.6989	0.7504	0.1584	0.1592	0.1305	0.1826	0.1206	0.2328	0.2372
1y8e	0.046	0.0260	0.1026	0.2383	0.1358	0.6568	0.6292	0.5927	0.6697	0.8406	0.0855	0.0533	0.0321	0.0415	0.0456	0.1302	0.0847
2a01	0.023	0.0020	0.0921	0.0780	-0.0141	0.6109	0.5909	0.5640	0.6168	0.8682	0.0902	0.0461	0.0284	0.0450	0.0407	0.1477	0.0780
2akf	0.005	-0.0310	0.2250	0.0225	-0.2025	0.4870	0.4743	0.4408	0.5054	0.5912	0.0751	0.0648	0.0351	0.0703	0.0733	0.1542	0.1366
2f80	0.624	0.5550	0.4631	3.2842	2.8211	0.5025	0.4878	0.4480	0.5316	0.6465	0.1221	0.1108	0.0707	0.1289	0.1233	0.2430	0.2271
2q23	0.002	0.0000	0.0071	0.0044	-0.0028	0.7722	0.7481	0.7439	0.7529	0.2574	0.1844	0.1268	0.1210	0.1330	0.0879	0.2388	0.1695
2qgh	0.165	0.1040	0.2961	0.4447	0.1486	0.5785	0.5790	0.5712	0.5871	0.5775	0.1008	0.1007	0.0928	0.1076	0.1050	0.1742	0.1739
2qz5	0.663	0.5990	0.2844	2.4925	2.2080	0.4912	0.4924	0.4897	0.4950	0.4543	0.0885	0.0870	0.0702	0.1007	0.1203	0.1802	0.1767
2uwf	0.065	0.0090	0.3027	0.2481	-0.0546	0.5739	0.5690	0.5583	0.5790	0.6425	0.0805	0.0774	0.0706	0.0820	0.0923	0.1403	0.1360
2xi5	0.026	-0.0060	0.1667	0.1102	-0.0565	0.6358	0.6316	0.6185	0.6438	0.6910	0.0986	0.0985	0.0914	0.1031	0.0825	0.1551	0.1560
2y8v	0.040	-0.0040	0.2604	0.2010	-0.0594	0.4937	0.4921	0.4781	0.5065	0.5178	0.0837	0.0836	0.0653	0.0968	0.0819	0.1695	0.1699
2z2q	0.006	-0.0020	0.0313	0.0115	-0.0197	0.8093	0.7859	0.7817	0.7908	0.8193	0.1733	0.1213	0.1154	0.1275	0.0720	0.2141	0.1543
2zhi	0.727	0.6840	0.2324	3.9297	3.6973	0.5119	0.4922	0.4593	0.5263	0.6376	0.126	0.1182	0.0958	0.1291	0.0971	0.2461	0.2401
3ai3	0.036	-0.0010	0.1745	0.1885	0.0140	0.3929	0.3860	0.3659	0.4086	0.4782	0.0932	0.0884	0.0718	0.0992	0.0953	0.2372	0.2290
3cji	-0.004	-0.0060	0.0078	-0.0076	-0.0154	0.7107	0.7096	0.6938	0.7262	0.7354	0.1209	0.1220	0.1012	0.1385	0.0882	0.1701	0.1719
3e3z	0.005	-0.0340	0.2617	0.0090	-0.2528	0.3231	0.3085	0.2987	0.3180	0.4068	0.0707	0.0473	0.0424	0.0496	0.1147	0.2188	0.1533
3fk0	0.037	-0.0030	0.2454	0.2216	-0.0238	0.4406	0.4181	0.3969	0.4419	0.5717	0.0966	0.0779	0.0520	0.0936	0.0924	0.2192	0.1863
3iqv	-0.002	-0.0320	0.2439	-0.0037	-0.2476	0.4303	0.3926	0.3687	0.4178	0.5935	0.1206	0.0915	0.0799	0.0961	0.0969	0.2803	0.2331
3k5d	0.030	-0.0060	0.1782	0.1200	-0.0582	0.7871	0.7886	0.7780	0.7995	0.7004	0.1473	0.1480	0.1303	0.1636	0.0892	0.1871	0.1877
3kh2	0.039	-0.0110	0.2304	0.1322	-0.0982	0.8029	0.8053	0.7916	0.8204	0.3459	0.2502	0.2444	0.2375	0.2509	0.1282	0.3116	0.3035
3n7x	-0.004	-0.0110	0.0252	-0.0073	-0.0325	0.5650	0.5620	0.5576	0.5664	0.6116	0.0782	0.0754	0.0685	0.0814	0.0992	0.1384	0.1342

pdb_id	B_CV_u_main	B_CV_u_side	B_CV_u_water	B_frac_delta_u	B_frac_delta_u_pos	B_frac_delta_u_neg	B_frac_delta_u_abs	B_ratio_u_means	B_ratio_u_stdevs	WC_per_buried_B	WC_avg_B_bond_diff	WC_rms_B_bond_diff	WC_rms_B_z	SFC_B_mean	SFC_B_stddev	SFC_B_Wilson	SFC_Boveral	SFC_B_Patterson	SFC_B_Patterson_diff
15c8	0.3101	0.3388	0.1926	-0.1053	0.0000	-0.1053	0.1053	0.9682	0.8861	0.00	2.98	4.00	1.247	36.74	22.07	41.91	37.60	36.96	-0.71
1a8v	0.2008	0.2384	0.1500	0.0281	0.0281	0.0000	0.0281	0.8763	0.7380	0.00	3.71	5.01	1.199	32.44	16.27	32.36	30.35	29.64	0.20
1j78	0.2107	0.1993	0.1071	0.2102	0.2102	0.0000	0.2102	0.9784	1.0342	0.00	4.33	5.70	1.205	58.15	20.95	57.07	41.59	38.14	-7.96
1sbm	0.1042	0.1079	0.1813	-0.0189	0.0000	-0.0189	0.0189	0.9844	0.9506	0.00	0.31	0.46	0.336	21.15	10.05	29.33	24.48	22.94	-1.72
1tzb	0.1475	0.1546	0.1941	0.0154	0.0154	0.0000	0.0154	0.9543	0.9106	0.00	0.52	0.71	0.333	14.23	7.09	14.68	18.78	18.35	-1.35
1w48	0.2019	0.2613	0.1607	0.0044	0.0044	0.0000	0.0044	0.9250	0.7147	0.00	4.57	6.06	1.506	38.42	18.65	42.35	34.49	33.55	-2.02
1y8e	0.0542	0.0620	0.0542	-0.0725	0.0000	-0.0725	0.0725	0.8850	0.7735	0.00	2.43	3.00	0.926	34.63	9.51	44.94	42.32	41.16	0.64
2a01	0.0504	0.0730	0.0469	-0.1682	0.0000	-0.1682	0.1682	0.9144	0.6311	0.00	2.26	2.77	0.914	30.11	9.93	45.14	41.95	40.68	0.88
2akf	0.0796	0.1391	0.1240	0.2261	0.2261	0.0000	0.2261	0.8722	0.4993	0.00	1.67	2.43	0.641	19.16	6.19	18.88	18.29	17.20	-6.41
2f80	0.1578	0.2425	0.1907	0.0754	0.0754	0.0000	0.0754	0.8427	0.5485	0.00	3.04	4.56	1.205	21.22	11.22	21.53	22.72	21.46	-2.76
2q23	0.1627	0.1767	0.3415	-0.1552	0.0000	-0.1552	0.1552	0.9880	0.9098	0.00	1.21	1.74	0.406	45.98	16.65	54.74	52.53	51.62	-2.58
2qgh	0.1625	0.1833	0.1818	-0.1292	0.0000	-0.1292	0.1292	0.9729	0.8625	0.00	1.30	1.71	0.557	27.23	9.60	38.16	32.36	31.87	-3.14
2qz5	0.1434	0.2034	0.2648	-0.3064	0.0000	-0.3064	0.3064	0.9893	0.6971	0.71	1.17	1.57	0.613	19.67	7.06	30.20	34.63	31.46	-5.47
2uwf	0.1265	0.1416	0.1437	-0.1128	0.0000	-0.1128	0.1128	0.9642	0.8610	0.00	1.05	1.60	0.45	26.51	7.54	35.55	35.75	33.19	0.66
2xi5	0.1478	0.1601	0.1194	-0.0430	0.0000	-0.0430	0.0430	0.9607	0.8865	0.00	1.37	2.04	0.476	32.67	10.43	44.31	34.73	34.09	-1.07
2y8v	0.1366	0.1911	0.1582	-0.1568	0.0000	-0.1568	0.1568	0.9439	0.6746	0.04	1.56	2.31	0.679	19.80	6.97	30.29	28.98	26.84	-1.14
2z2q	0.1476	0.1612	0.0879	0.0170	0.0170	0.0000	0.0170	0.9885	0.9051	0.00	1.31	1.88	0.389	49.83	16.21	62.92	48.01	44.03	-5.25
2zhi	0.2086	0.2453	0.1523	0.0559	0.0559	0.0000	0.0559	0.8727	0.7421	0.00	3.68	5.48	1.532	21.95	11.60	24.78	22.87	21.51	-1.89
3ai3	0.1962	0.2428	0.1993	-0.2688	0.0000	-0.2688	0.2688	0.8955	0.7238	2.37	1.07	1.64	0.561	12.87	6.48	26.65	25.58	23.84	1.02
3cji	0.1459	0.1907	0.1199	0.0036	0.0036	0.0000	0.0036	0.9554	0.7307	0.00	1.92	3.63	0.712	41.01	15.76	47.41	41.44	38.62	-1.22
3e3z	0.1419	0.1560	0.2820	-0.3938	0.0000	-0.3938	0.3938	0.9393	0.8548	3.92	0.41	0.61	0.357	48.97	5.72	26.98	25.80	25.16	-17.60
3fk0	0.1310	0.2118	0.1616	-0.1151	0.0000	-0.1151	0.1151	0.8982	0.5556	0.05	1.63	2.22	0.78	16.10	7.60	23.16	22.63	21.07	-1.43
3iqv	0.2167	0.2300	0.1633	0.0600	0.0600	0.0000	0.0600	0.8825	0.8314	0.00	1.48	2.15	0.701	15.69	9.14	14.38	18.54	18.14	-7.33
3k5d	0.1675	0.2046	0.1274	-0.0576	0.0000	-0.0576	0.0576	0.9731	0.7965	0.02	3.69	4.89	1.069	50.29	18.49	63.15	45.73	45.35	-5.12
3kh2	0.3000	0.3058	0.3706	0.0146	0.0146	0.0000	0.0146	0.9649	0.9466	0.00	1.47	1.88	0.468	50.60	25.86	59.00	43.34	42.47	-1.61
3n7x	0.1228	0.1437	0.1622	-0.1972	0.0000	-0.1972	0.1972	0.9845	0.8415	0.00	1.18	1.68	0.427	25.40	7.53	41.62	36.18	32.83	-7.38

pdb_id	ProSA_fracdelta_en_cc	ProSA_fracdelta_en_su	ProSA_fracdelta_en_pa	PDB_ratio_water_amir	PDB_ratio_hydrogen_a	SFC_ratio_atoms_wate	ProSA_fracdelta_z_con	ProSA_fracdelta_z_sur	ProSA_fracdelta_z_pai	V3D_fracdelta_quality	Errat_qual_rem	WC_in_out_z	WC_pack_avg	MP_molprobrity_score	MP_rama_outliers	MP_rama_unfavored	PC_per_rama_labelled	PC_per_rama_disfavor	PC_per_rama_ungener
15c8	-0.3295	-0.2903	0.5776	0.0283	0	0.0272	-0.0146	-0.1144	0.1224	0.1064	17.94	0.949	-0.583	3.17	0.75	5.78	0.0240	12.9	0.8
1a8v	-0.5673	-0.2558	0.0443	0.0486	0	0.0463	-0.1846	-0.2570	-0.0008	0.0535	1.98	0.97	-0.958	2.74	1.35	3.14	0.0224	8.9	1
1j78	-0.2144	0.1816	-1.3063	0.0443	0	0.0419	0.0010	0.0956	-0.2694	-0.1986	8.01	1.033	-0.48	2.50	0.80	6.21	0.0345	10.4	0.4
1sbm	-0.5080	-0.1016	-1.8986	0.2478	0	0.1930	-0.1038	-0.0098	-0.4469	-0.0193	2.81	0.99	-0.479	1.57	0.00	0.68	0.0034	7.9	0
1tzb	-0.2880	0.0068	-0.6933	0.1356	0	0.1129	-0.0751	0.0142	-0.1874	0.0523	2.94	1.009	-0.531	1.87	0.00	2.48	0.0168	5.5	0.3
1w48	-0.0254	0.0798	0.9978	0.1153	0	0.1021	0.0511	-0.0102	0.1511	-0.0140	3.75	1.029	-0.506	2.31	0.45	1.68	0.0056	7.3	0.4
1y8e	0.4881	1.0316	1.5346	0.1332	0	0.1129	0.3583	0.3668	0.4080	-0.2532	65.27	1.106	-3.269	4.15	8.90	25.88	0.1698	34.5	7.5
2a01	-0.0216	0.6726	-0.8162	0.0904	0	0.0810	0.3517	0.3735	0.3145	-0.5113	61.33	1.176	-1.536	3.73	4.56	9.96	0.0719	11.3	3
2akf	0.2382	2.6027	-0.3280	0.1233	0	0.1085	0.4385	1.2335	-0.1056	0.0381	0.00	0.953	1.192	1.56	0.00	0.00	0.0000	1.1	0
2f80	-0.0433	0.7040	0.5515	0.1177	0	0.1068	-0.0549	-0.0713	-0.0158	0.2949	9.94	0.954	-0.653	2.01	0.00	0.00	0.0000	1.9	0
2q23	0.1884	0.4458	1.1721	0.0008	0	0.0008	0.1200	0.1236	0.2012	-0.0424	25.90	1.015	-0.852	3.43	1.65	9.29	0.0454	18.4	0.9
2qgh	-0.1094	0.0253	0.2678	0.0390	0	0.0372	0.0166	-0.0203	0.1524	-0.0246	3.70	1.02	-0.428	2.62	0.26	2.33	0.0155	9.2	0
2qz5	-0.2638	-0.3022	1.5126	0.0331	0	0.0321	-0.0218	-0.1688	0.2467	-0.0531	11.11	0.996	-0.745	2.67	0.00	6.95	0.0364	14.3	0.8
2uwf	-0.5525	-0.3789	-1.5135	0.0711	0	0.0663	-0.1339	-0.1548	-0.1653	0.1420	7.76	0.987	-0.531	2.20	0.00	2.26	0.0113	7.8	0.3
2xi5	-0.0621	0.6834	-0.6364	0.0758	0	0.0696	0.1252	0.2759	-0.1837	0.0472	3.87	1.069	-0.109	1.73	0.14	1.08	0.0055	10	0.1
2y8v	-0.5453	-0.5391	-0.4873	0.0654	0	0.0614	-0.1180	-0.1124	-0.1626	0.1213	3.96	0.952	-0.734	1.79	0.00	1.89	0.0126	10.5	0.5
2z2q	0.2761	0.5878	1.3269	0.0268	0	0.0252	0.1982	0.2173	0.2463	-0.0500	19.77	1.002	-0.668	2.99	0.41	3.62	0.0197	12.3	0.1
2zhi	-0.8549	-0.5305	-3.0437	0.1529	0	0.1323	-0.1731	-0.1549	-0.1975	-0.0081	1.31	0.956	-0.309	2.44	0.64	2.88	0.0128	5.6	0.7
3ai3	-0.3874	-0.3166	-0.0458	0.0463	0	0.0427	-0.0651	-0.0779	0.0322	0.2394	0.39	0.942	-0.157	1.63	0.00	1.92	0.0163	8.1	0.4
3cji	0.4547	0.8317	1.9508	0.0425	0	0.0409	0.3743	0.4113	0.2994	-0.0871	13.96	1.054	-1.167	2.66	0.76	3.93	0.0241	12.8	0.7
3e3z	-0.4087	-0.2599	0.2433	0.1580	0	0.1327	-0.0254	-0.0548	0.0997	0.0825	4.19	0.974	-0.323	1.81	0.00	2.82	0.0000	10.1	0.7
3fk0	-0.4635	-0.3069	-1.3529	0.1621	0	0.1371	-0.1759	-0.1067	-0.1717	0.2630	3.58	0.928	-0.423	1.52	0.00	2.12	0.0141	8.4	0.3
3iqv	-0.7108	-0.2833	-2.2811	0.2328	0	0.1710	-0.0145	-0.0255	-0.0114	-0.1127	3.03	0.975	0.088	1.49	0.00	1.46	0.0085	3.2	0
3k5d	0.0448	-0.0634	1.8840	0.0080	0	0.0078	0.0694	-0.0142	0.1836	0.0867	13.90	1.009	-0.867	2.55	0.27	5.87	0.0269	14.5	0.3
3kh2	-0.5604	0.2580	-1.5282	0.0159	0	0.0151	-0.1910	-0.0010	-0.4741	0.0285	2.59	0.953	-0.628	1.60	0.52	2.34	0.0106	5.5	0.5
3n7x	0.3157	0.3798	2.4529	0.0664	0	0.0622	0.2479	0.1714	0.3248	-0.1075	14.13	1.073	-1.294	2.08	0.00	3.03	0.0067	10.5	0

pdb_id	PC_per_rama_disallow	WC_rama_z	WC_back_z	TAP_remainder	MP_rotamers	PC_per_rota_labelled	PC_stdv_chi1gminus	PC_stdv_chi1trans	PC_stdv_chi1gplus	PC_stdv_chi1pooled	PC_stdv_chi2trans	WC_rota_z	WC_Vm_obs	SFC_vol_not_model	SFC_matthews	SFC_solv_content	WC_rms_BA_z	MP_cbetadev	PC_max_dev	PC_bond_ratio	WC_rms_tau_z
15c8	0.3	-1.933	0.391	0.2407	17.25	0.0542	22.8	22.8	20.5	21.9	24.9	-4.915	3.394	53.9	3.35	63.00	0.599	0	4.3	3.9	1.312
1a8v	0	0.202	0.821	0.1829	8.21	0.0129	17.7	16.0	11.8	14.0	16.5	-1.444	2.197	25.7	2.13	41.92	1.495	2	4.2	13.0	1.417
1j78	0	-1.280	-0.319	0.2091	2.33	0.0114	12.9	12.1	10.8	11.7	12.8	-1.947	3.222	51.0	3.20	61.29	0.551	0	6.2	3.6	1.357
1sbm	0	-0.149	0.559	0.1833	1.55	0.0105	7.4	10.5	9.3	9.4	10.3	0.411	3.018	35.1	2.44	49.10	0.566	0	15.7	3.0	1.336
1tzb	0.2	-0.031	0.257	0.1619	3.62	0.0175	10.3	11.8	10.6	11.3	13.3	-0.402	2.136	19.3	1.84	32.53	0.638	1	10.2	10.7	0.763
1w48	0	-0.880	-0.005	0.1927	4.05	0.0104	10.5	14.5	12.8	13.0	11.8	-1.958	2.808	38.7	2.56	51.62	0.754	4	4.6	2525.1	1.568
1y8e	0	-5.271	-1.132	0.3228	18.78	0.1083	18.4	19.0	25.9	24.1	26.0	-5.932	5.472	60.6	4.97	75.04	1.484	7	8.0	8.9	1.337
2a01	0.2	-5.685	-2.891	0.2578	10.28	0.0582	18.1	15.7	15.1	17.2	17.3	-4.504	6.142	67.3	5.72	78.34	1.194	7	10.5	9.6	2.015
2akf	0	5.235	1.547	0.1243	0	0.0000	1.5	9.1	7.4	9.4	11.3	2.332	1.900	12.3	1.75	29.10	0.785	0	3.0	3.2	0.798
2f80	0	-1.206	1.499	0.1775	5.03	0.0083	10.5	18.0	9.1	11.8	14.9	0.553	2.626	30.9	2.22	44.13	1.29	2	3.7	5.9	0.826
2q23	0.2	-3.764	-0.972	0.2534	12.1	0.0482	17.2	18.9	19.4	18.8	18.4	-5.433	73.240	76.9	74.20	98.33	0.941	1	8.4	6.0	1.926
2qgh	0	-1.584	-0.064	0.2212	7.12	0.0233	13.4	17.5	13.0	14.6	14.0	-2.718	2.745	43.7	2.67	53.60	0.601	0	4.8	3.5	1.317
2qz5	0	-1.992	0.190	0.2283	2.14	0.0099	11.1	16.0	11.8	13.0	12.8	-1.976	2.216	27.8	2.18	43.08	0.706	0	4.0	4.2	1.441
2uwf	0.3	-0.985	-1.357	0.1994	4.14	0.0207	16.7	16.6	11.4	13.8	16.3	-1.008	2.106	24.7	1.99	37.65	0.732	1	10.7	5.5	0.992
2xi5	0	0.464	1.225	0.1832	3.24	0.0037	12.2	14.3	12.0	13.1	13.1	-1.317	180.800	55.2	3.50	64.61	0.776	2	7.9	5.0	1.002
2y8v	0.4	-1.627	-1.347	0.1894	1.84	0.0029	10.0	12.8	10.3	11.4	16.5	-1.279	3.403	37.4	2.44	49.12	0.984	10	14.8	2948.3	1.259
2z2q	0	-2.163	-0.362	0.2223	11.26	0.0261	17.3	19.3	18.0	18.3	17.4	-4.491	73.920	85.4	73.10	98.31	1.046	7	4.6	8.1	1.851
2zhi	0.4	0.279	-1.349	0.1720	5.97	0.0098	13.1	10.6	12.8	12.3	18.2	-2.094	2.146	17.1	1.90	34.62	1.069	0	11.4	11.7	0.945
3ai3	0	-0.073	0.172	0.1603	2.18	0.0035	12.2	12.1	8.8	10.6	14.0	-1.263	2.026	23.9	1.96	36.70	0.671	2	10.3	4.5	0.938
3cji	0.3	-1.480	-0.796	0.2122	6.48	0.0218	11.6	16.0	13.0	13.7	15.9	-2.951	161.000	99.0	156.00	99.21	0.642	0	8.8	4.1	1.372
3e3z	0.6	-1.081	-1.511	0.1989	1.23	0.0080	10.8	10.4	11.2	11.2	12.9	0.06	2.221	97.3	1.92	35.55	0.754	0	5.3	3.3	1.045
3fk0	0	-0.834	-0.647	0.1833	1.14	0.0124	9.1	10.7	8.8	9.6	9.7	0.145	2.288	24.2	1.98	37.42	0.736	1	6.0	4.2	1.513
3iqv	0	2.620	1.373	0.1602	0.43	0.0068	12.3	10.1	6.4	8.2	9.4	1.72	2.595	28.7	2.01	38.45	1.032	2	4.2	4.8	0.934
3k5d	0.3	-2.598	-1.158	0.2128	3.12	0.0137	9.9	11.7	11.5	11.4	14.4	-1.123	3.260	52.9	3.27	62.10	0.449	3	5.7	2.5	0.777
3kh2	0	-1.457	0.714	0.1726	1.94	0.0070	15.3	12.5	11.4	12.3	15.3	-1.876	3.781	56.6	3.67	66.25	0.528	0	4.9	2.8	0.822
3n7x	0	-1.939	-0.899	0.2170	1.91	0.0162	10.7	10.2	9.6	10.4	9.5	-1.47	3.792	74.8	108.00	98.86	0.693	0	4.5	3.7	1.397

pdb_id	MP_clashscore	PC_per_bad	PC_per_planar_outside	WC_planar_z	PC_stdv_omega	WC_omega_stddev	PC_stdv_zeta	WC_rms_improper_z	WC_chiral_dev	PC_per_mcbl_outside	WC_rms_BL_dev	WC_rms_BL_z	PC_per_mcba_outside	WC_rms_BA_dev	WC_bump_total	WC_bump_per_res	WC_bump_num	WC_bump_squared	WC_bump_mildest	WC_bump_second	WC_bump_middle	WC_bump_fourth	WC_bump_worst	PC_stdv_hbond
15c8	22.1	3.1	2.4	0.126	1.2	1.210	0.9	0.576	0.739	0.0	0.007	0.308	1.6	1.346	6.711	0.205	88	0.726	88	0	0	0	0	0.8
1a8v	23.3	9.1	2.2	1.040	5.5	5.512	2.0	1.756	1.927	1.0	0.013	0.614	13.0	2.780	8.662	0.212	49	3.466	37	6	5	1	0	0.7
1j78	20.8	6.7	1.1	0.247	1.0	1.050	1.0	0.505	0.625	0.0	0.006	0.270	0.6	1.221	13.885	0.156	137	2.496	128	8	1	0	0	0.7
1sbm	7.8	10.9	0.8	0.252	1.3	1.261	1.0	0.525	0.626	0.0	0.006	0.258	1.0	1.256	1.050	0.071	21	0.08	21	0	0	0	0	0.7
1tzb	6.3	6.0	0.0	0.501	5.3	5.318	1.5	0.629	0.751	0.1	0.007	0.309	0.7	1.253	2.006	0.035	21	0.406	19	2	0	0	0	0.7
1w48	23.0	12.4	4.8	0.281	1.8	1.810	1.0	0.674	0.784	0.1	0.010	0.408	2.0	1.588	19.352	0.162	147	7.868	128	16	0	1	2	0.7
1y8e	82.1	6.6	0.0	0.216	2.2	2.164	2.1	1.035	1.065	1.0	0.010	0.495	13.0	2.795	57.653	0.532	259	27.503	175	55	19	6	4	0.9
2a01	88.4	22.2	0.0	0.162	1.9	1.870	1.8	0.938	0.846	0.5	0.009	0.465	8.5	2.313	110.960	0.626	456	51.638	301	92	44	12	7	0.8
2akf	11.0	20.8	0.0	0.844	3.3	3.289	1.3	0.873	0.994	0.2	0.015	0.660	1.1	1.535	1.413	0.135	13	0.284	12	1	0	0	0	0.4
2f80	9.0	9.6	0.0	0.420	5.6	5.650	2.0	0.788	0.921	0.0	0.011	0.518	6.2	2.354	4.281	0.086	17	4.343	15	0	0	0	2	0.7
2q23	40.2	3.6	4.9	0.364	1.9	1.908	1.5	0.915	1.119	0.7	0.019	0.776	5.2	2.110	29.086	0.286	282	5.506	262	18	2	0	0	0.9
2qgh	25.7	7.6	0.7	0.221	1.3	1.281	0.9	0.578	0.685	0.0	0.007	0.304	1.3	1.325	4.005	0.137	54	0.531	53	1	0	0	0	0.7
2qz5	31.0	5.6	2.0	0.253	1.4	1.380	1.2	0.676	0.842	0.1	0.009	0.392	2.3	1.573	7.171	0.252	77	1.307	74	2	1	0	0	0.9
2uwf	14.9	19.7	0.0	0.648	6.0	6.018	1.7	0.740	0.893	0.0	0.014	0.580	0.9	1.414	8.476	0.171	61	2.198	50	9	2	0	0	0.7
2xi5	6.2	13.3	0.0	0.852	5.8	5.814	1.7	0.890	1.076	0.5	0.018	0.759	1.3	1.582	8.726	0.091	67	2.232	59	6	2	0	0	0.7
2y8v	12.0	11.1	1.4	1.144	6.3	6.327	2.8	1.164	1.390	2.9	0.025	1.039	3.1	2.018	17.331	0.132	148	4.069	127	19	2	0	0	0.7
2z2q	29.4	5.1	6.1	0.453	2.5	2.472	1.7	0.993	1.239	1.1	0.021	0.852	6.5	2.275	16.088	0.174	173	2.85	161	12	0	0	0	0.8
2zhi	15.5	15.6	0.8	0.899	4.6	4.622	1.2	0.604	0.678	0.1	0.008	0.383	5.3	1.946	2.740	0.108	34	0.377	34	0	0	0	0	0.6
3ai3	6.7	7.2	0.0	0.672	5.6	5.571	1.6	0.767	0.896	0.0	0.014	0.575	0.5	1.394	97.758	0.178	187	105.35	100	28	4	0	55	0.6
3cji	19.1	2.1	1.1	0.227	1.5	1.530	1.1	0.629	0.790	0.0	0.007	0.288	1.8	1.484	7.276	0.104	83	1.149	80	3	0	0	0	0.8
3e3z	12.1	19.3	0.0	0.891	6.3	6.283	1.5	0.873	1.045	0.0	0.016	0.654	0.8	1.472	2.213	0.097	17	0.669	15	1	1	0	0	0.7
3fk0	8.3	17.3	3.0	0.328	2.1	2.143	1.2	0.742	0.898	0.0	0.011	0.414	2.1	1.620	4.467	0.115	49	0.842	44	5	0	0	0	0.7
3iqv	9.3	23.6	8.0	1.607	4.7	4.657	1.7	1.194	1.436	2.8	0.026	1.068	2.4	1.981	8.981	0.186	45	3.671	32	11	0	2	0	0.5
3k5d	19.3	3.6	0.5	0.105	4.9	4.950	0.8	0.557	0.649	0.0	0.005	0.212	0.1	0.913	7.431	0.090	101	0.973	100	1	0	0	0	0.8
3kh2	5.7	4.1	0.0	0.276	4.3	4.344	1.1	0.454	0.509	0.0	0.013	0.368	0.1	1.042	2.829	0.037	29	0.48	26	3	0	0	0	0.6
3n7x	15.5	2.3	0.9	0.256	1.5	1.537	1.0	0.640	0.807	0.1	0.007	0.288	1.7	1.487	1.880	0.077	23	0.352	21	2	0	0	0	0.7

pdb_id	WC_per_donors_burie	WC_per_acceptors_bu	WC_per_acceptors_no	WC_per_acceptors_ess	WC_per_acceptors_vp	WC_per_acceptors_po	WC_per_donors_no_H	WC_per_donors_ess_n	WC_per_donors_vpoor	WC_per_donors_poor	SFC_min_est_error	SFC_max_est_error	SFC_diff_est_error	SFC_DPI	SFC_Luzzati	SFC_displacement_std
15c8	0.4662	0.3450	1.1139	1.0000	0.1181	0.0000	0.0505	1.0000	0.0875	0.0000	6.2673	0.9478	-5.3195	0.2627	0.2980	0.1127
1a8v	0.4925	0.3541	1.0000	0.1120	0.0000	0.0000	1.0000	0.0976	0.0000	0.0000	0.0193	0.1853	0.1660	0.1913	0.3533	0.1457
1j78	0.5008	0.3568	1.0000	0.1777	0.0000	0.0059	1.0000	0.0694	0.0033	0.0116	34.5800	0.4409	-34.1391	0.2090	0.3338	0.1136
1sbm	0.6277	0.4243	1.2613	1.0000	0.1307	0.0000	0.0646	1.0000	0.0342	0.0000	0.0293	0.1096	0.0803	0.0863	0.1984	0.0702
1tzb	0.6316	0.5040	1.1587	1.0000	0.1066	0.0000	0.0815	1.0000	0.0426	0.0000	0.0080	0.0462	0.0382	0.0361	0.1430	0.0716
1w48	0.5295	0.3948	1.1345	1.0000	0.1327	0.0000	0.0550	1.0000	0.0753	0.0014	0.0270	0.1536	0.1266	0.2072	0.2179	0.0903
1y8e	0.2350	0.1423	1.0000	0.3604	0.0000	0.0360	1.0000	0.4286	0.0060	0.0119	1.7851	0.0700	-1.7151	0.1248	0.2332	0.0990
2a01	0.4093	0.1785	1.0000	0.0849	0.0000	0.0236	1.0000	0.2461	0.0045	0.0201	4.6268	0.1709	-4.4559	0.1616	0.3530	0.1285
2akf	0.4780	0.3585	1.3333	1.0000	0.0702	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0085	0.0996	0.0911	0.0462	0.1570	0.1217
2f80	0.4704	0.4481	0.9587	1.0000	0.0826	0.0000	0.0472	1.0000	0.0709	0.0000	0.0362	0.0684	0.0322	0.0710	0.1779	0.0772
2q23	0.6911	0.9935	0.4736	1.0000	0.4704	0.0013	0.2353	1.0000	0.2064	0.0000	0.1164	0.5761	0.4597	0.1163	1.1609	2.6621
2qgh	0.5894	0.4724	1.0390	1.0000	0.1454	0.0000	0.0743	1.0000	0.0681	0.0000	0.8035	0.1904	-0.6131	0.2414	0.2952	0.1499
2qz5	0.4988	0.3865	1.0678	1.0000	0.0565	0.0000	0.0474	1.0000	0.0806	0.0000	0.0438	0.1800	0.1362	0.1659	0.3688	0.2223
2uwf	0.5633	0.4186	1.0931	1.0000	0.1417	0.0000	0.0436	1.0000	0.0570	0.0000	0.4834	27.5820	27.0986	1.2848	0.3007	0.0500
2xi5	0.4948	0.3190	1.3013	1.0000	0.0597	0.0000	0.0288	1.0000	0.0231	0.0000	0.0194	0.0808	0.0614	0.1596	0.2669	0.1266
2y8v	0.5359	0.4353	1.0123	1.0000	0.1501	0.0000	0.0585	1.0000	0.0789	0.0000	0.0157	0.0816	0.0659	0.1546	0.2045	0.0952
2z2q	0.6843	0.9936	0.5116	1.0000	0.3797	0.0006	0.2344	1.0000	0.1387	0.0000	0.0960	0.5738	0.4778	0.0797	1.2133	1.6271
2zhi	0.5207	0.4206	1.1557	1.0000	0.1321	0.0000	0.0556	1.0000	0.0238	0.0000	0.0152	0.0834	0.0682	0.1077	0.1719	0.0874
3ai3	0.5862	0.4630	1.0266	1.0000	0.1555	0.0000	0.0412	1.0000	0.1235	0.0000	0.0106	0.0465	0.0359	0.1399	0.1771	0.0807
3cji	0.6280	0.9959	0.5017	1.0000	0.3430	0.0000	0.2510	1.0000	0.1553	0.0000	0.0837	0.4465	0.3628	0.0380	1.0246	0.1128
3e3z	0.5692	0.4022	1.2613	1.0000	0.0901	0.0000	0.0270	1.0000	0.0270	0.0000	0.0481	0.8498	0.8017	0.0969	0.8535	0.0089
3fk0	0.5967	0.4700	1.1213	1.0000	0.1213	0.0000	0.0642	1.0000	0.0419	0.0000	0.0057	0.0546	0.0489	0.0982	0.1516	0.0712
3iqv	0.5395	0.3995	1.1401	1.0000	0.0955	0.0000	0.0366	1.0000	0.0419	0.0000	0.0104	0.1494	0.1390	0.0309	0.5670	22.5920
3k5d	0.5264	0.3947	1.0219	1.0000	0.1516	0.0000	0.0909	1.0000	0.1263	0.0024	0.0549	0.2500	0.1951	14.6850	0.3647	0.1637
3kh2	0.5046	0.3911	1.1610	1.0000	0.0975	0.0000	0.0702	1.0000	0.0669	0.0000	0.0618	0.2577	0.1959	0.3261	0.4393	0.1616
3n7x	0.7356	0.9873	0.5613	1.0000	0.3097	0.0000	0.1688	1.0000	0.1688	0.0000	0.0610	0.3456	0.2846	0.0722	1.1340	4.7536

pdb_id	SFC_Dens_mean	SFC_Dens_stddev	SFC_Dens_CV	SFC_real_space_corr	SFC_rstand_I	SFC_rstand_F	SFC_frac_refl_unacc	SFC_frac_refl_1sigma	SFC_frac_refl_3sigma	SFC_completeness	SFC_ani_ratio_1	SFC_ani_ratio_2	SFC_ani_ratio_3	SFC_Padd	SFC_scale	SFC_Ks
15c8	0.3485	0.0517	0.1484	0.9910	0.1180	0.1380	0.0000	0.8757	0.7006	89.8	1.0000	0.7320	0.8618	1939.13	1.04	0.728
1a8v	40.4295	989.2404	24.4683	0.9347	0.0440	0.0320	0.0000	0.9993	0.9211	97.4	0.8152	0.8900	1.0000	1607836.00	108.738	0.806
1j78	0.0856	0.0099	0.1157	0.9717	0.0330	4.1360	0.0000	0.9358	0.8531	99.2	0.9937	0.9937	1.0000	284.79	0.462	0.731
1sbm	0.7966	0.1356	0.1702	0.9907	0.0450	0.0550	0.0000	0.9776	0.6877	99.0	0.7179	1.0000	0.8869	2768.67	1.452	0.725
1tzb	89.6254	1127.0747	12.5754	0.9928	0.0250	0.0350	0.0000	0.9981	0.7733	87.6	1.0000	0.7487	0.7280	8912000.00	108.771	0.883
1w48	0.1729	0.0152	0.0879	0.9898	0.0450	0.0450	0.0000	0.9850	0.7881	94.6	0.5660	1.0000	0.6537	2403.52	0.589	0.709
1y8e	0.2330	0.0212	0.0910	0.9887	0.4010	0.2410	0.0000	0.9367	0.8153	100.0	0.9897	1.0000	0.9866	436.50	0.719	0.873
2a01	0.1498	0.0114	0.0761	0.9797	0.9580	0.6550	0.0000	0.7667	0.4226	100.0	0.9810	0.9810	1.0000	342.01	0.465	0.757
2akf	55.4126	698.6506	12.6082	0.9851	0.0770	0.0370	0.0775	1.0000	0.9196	92.6	0.9054	1.0000	0.7023	681650.00	76.158	0.900
2f80	0.5411	0.0641	0.1185	0.9925	0.0550	0.0580	0.0489	0.9268	0.7790	92.8	1.0000	0.8613	0.8839	612.55	0.938	0.852
2q23	0.0646	0.0117	0.1811	0.9485	0.0780	0.0670	0.0000	0.9889	0.6512	98.0	0.9841	0.9841	1.0000	27545.81	0.471	0.774
2qgh	0.0173	0.0001	0.0058	0.9836	2.1180	1.2600	0.0349	0.0036	0.0000	96.6	1.0000	1.0000	0.8982	3.07	0.045	0.682
2qz5	0.0374	0.0007	0.0187	0.9716	0.1860	0.0450	2.0997	4.4035	2.2796	98.8	0.3626	1.0000	0.4973	4.93	0.082	0.900
2uwf	0.3888	0.0268	0.0689	0.9974	0.0440	0.0350	0.1157	0.9694	0.8411	10.4	1.0000	0.0738	0.0789	400.18	1.015	0.900
2xi5	0.2475	0.0313	0.1265	0.9764	0.0340	0.0410	0.0000	0.9819	0.7717	95.4	1.0000	1.0000	0.8160	2745.90	0.783	0.900
2y8v	0.4660	0.0557	0.1195	0.9879	0.0280	0.0290	0.0459	0.9974	0.8579	89.5	1.0000	0.7015	0.7107	1786.81	0.887	0.827
2z2q	0.0510	0.0100	0.1961	0.9401	0.0890	0.0740	0.0000	0.9805	0.6091	84.1	1.0000	1.0000	0.7282	20318.31	0.476	0.820
2zhi	0.5287	0.0716	0.1354	0.9923	0.0300	0.0290	0.0000	0.9669	0.8889	91.7	0.8865	1.0000	0.9668	545.59	0.952	0.727
3ai3	0.8017	0.1057	0.1318	0.9894	0.0290	0.0370	0.0006	0.9999	0.7881	99.9	1.0000	0.9933	0.9612	6058.67	1.099	0.817
3cji	1.0355	2.4792	2.3942	0.9541	0.1420	0.0980	0.0000	0.9958	0.5709	74.3	0.9456	0.9456	1.0000	3092736.00	17.162	0.900
3e3z	0.0177	0.8687	49.0791	0.5047	0.0330	0.0280	0.0472	0.9931	0.8693	95.3	1.0000	0.6176	0.4247	455.82	7.411	0.708
3fk0	0.6546	0.0657	0.1004	0.9933	0.0850	0.0180	0.0000	13.5955	10.5349	99.7	1.0000	0.7754	0.8655	1898.34	0.922	0.735
3iqv	0.2829	0.0635	0.2245	0.7379	0.0300	0.0370	0.0000	0.9999	0.7786	99.9	1.0000	0.9286	0.8268	3493.69	0.233	0.853
3k5d	1.0644	1.1913	1.1192	0.9724	0.0500	0.0470	0.0000	0.9925	0.8048	99.6	0.7486	1.0000	0.9287	20174.94	5.089	0.900
3kh2	0.1279	0.0178	0.1392	0.9577	0.0600	0.0680	20.0868	0.9786	0.6931	91.1	0.7851	1.0000	0.9789	372.19	0.595	0.900
3n7x	0.1746	0.0432	0.2474	0.9905	0.1100	0.0890	0.0000	0.9901	0.6823	63.8	1.0000	0.6416	0.7830	13583.19	0.632	0.900

pdb_id	SFC_Bs	outlier score (unreduced ICA)
15c8	250.031	0.999988
1a8v	108.380	0.999918
1j78	250.046	1.000000
1sbm	250.003	0.999998
1tzb	250.001	0.999979
1w48	250.016	1.000000
1y8e	497.422	0.999942
2a01	250.049	0.999953
2akf	139.886	0.999959
2f80	250.001	0.999987
2q23	250.505	0.999901
2qgh	250.010	0.999953
2qz5	249.993	0.999995
2uwf	237.524	1.000000
2xi5	250.034	0.999999
2y8v	250.007	1.000000
2z2q	250.117	0.999922
2zhi	250.001	0.999997
3ai3	250.007	0.999997
3cji	500.000	0.999996
3e3z	249.983	1.000000
3fk0	250.002	0.999981
3iqv	250.002	1.000000
3k5d	500.000	0.999992
3kh2	500.000	1.000000
3n7x	249.990	0.999997