



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 07:43 AM UTC

PDB ID : 5KS5 / pdb\_00005ks5  
BMRB ID : 30135  
Title : Structure of the C-terminal Helical Repeat Domain of Elongation Factor 2 Kinase  
Authors : Piserchio, A.; Will, N.; Snyder, I.; Ferguson, S.B.; Giles, D.H.; Dalby, K.N.; Ghose, R.  
Deposited on : 2016-07-07

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0  
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)  
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) : 2.49

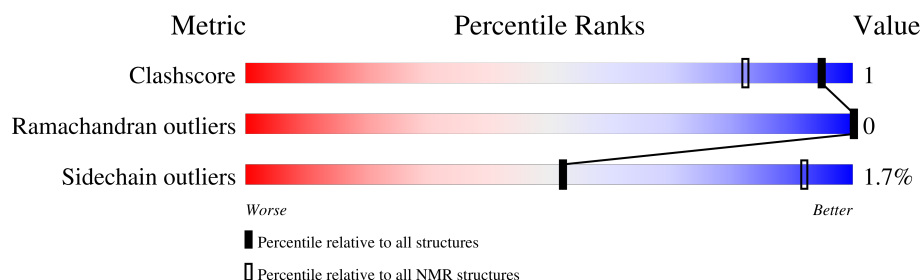
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 86%.

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<br>(#Entries) | NMR archive<br>(#Entries) |
|-----------------------|-----------------------------|---------------------------|
| Clashscore            | 229148                      | 14424                     |
| Ramachandran outliers | 224038                      | 12848                     |
| Sidechain outliers    | 223484                      | 12823                     |

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1   | A     | 103    |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 19 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:665-A:676, A:685-A:720<br>(48) | 0.27              | 19           |

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 4 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1568 atoms, of which 743 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Eukaryotic elongation factor 2 kinase.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |     |     |     |     |    | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|-----|-----|----|-------|
| 1   | A     | 103      | Total | C   | H   | N   | O   | S  | 0     |
|     |       |          | 1568  | 506 | 743 | 137 | 171 | 11 |       |

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

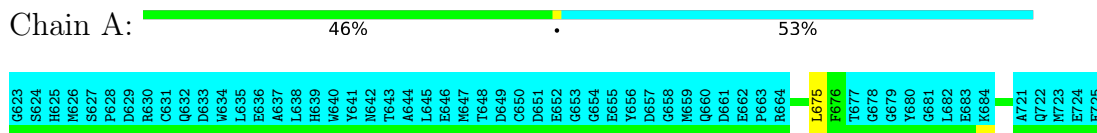
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment        | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A     | 623     | GLY      | -      | expression tag | UNP O00418 |
| A     | 624     | SER      | -      | expression tag | UNP O00418 |
| A     | 625     | HIS      | -      | expression tag | UNP O00418 |
| A     | 626     | MET      | -      | expression tag | UNP O00418 |

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase

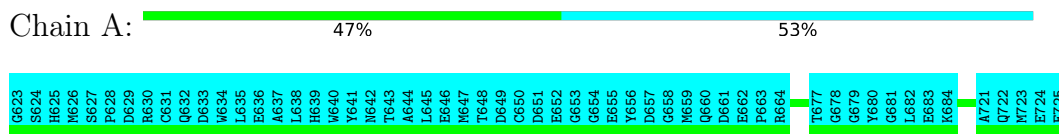


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

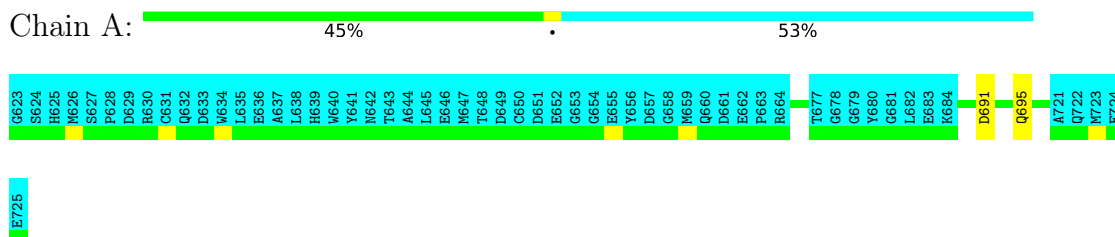
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



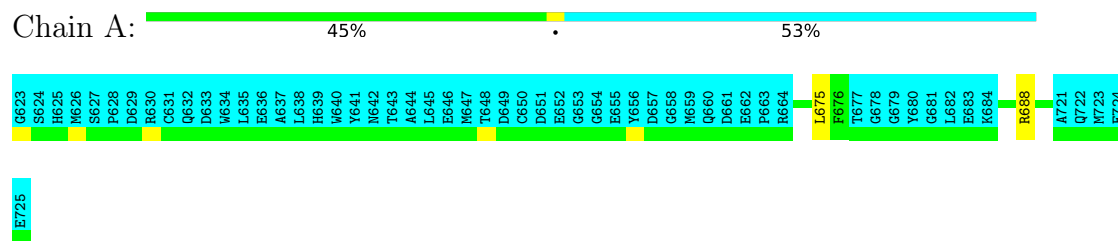
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



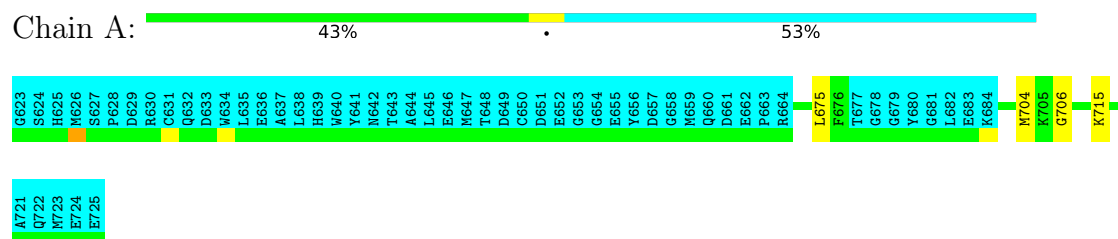
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



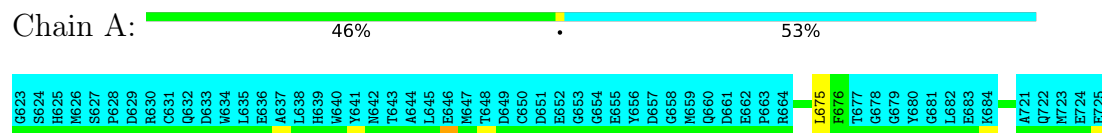
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



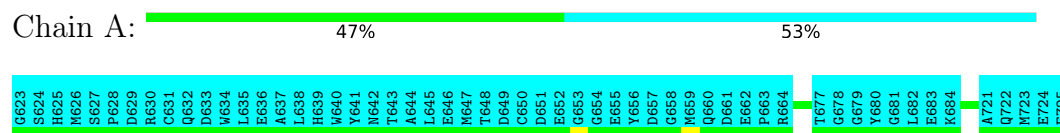
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



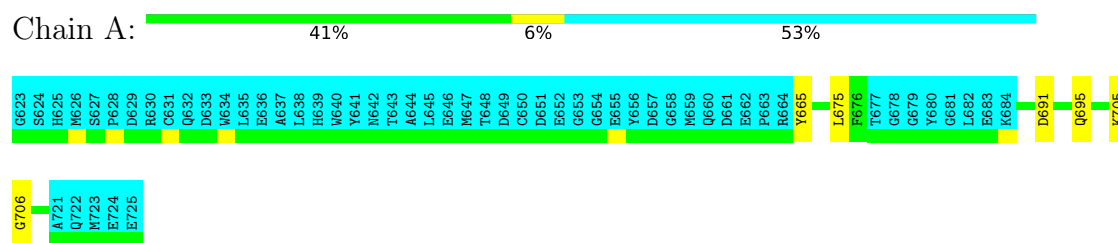
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



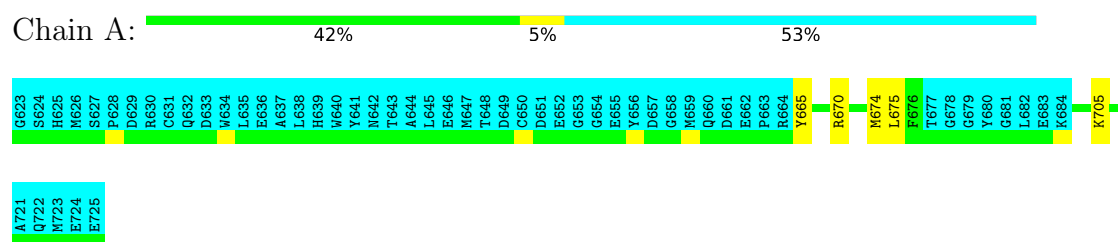
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



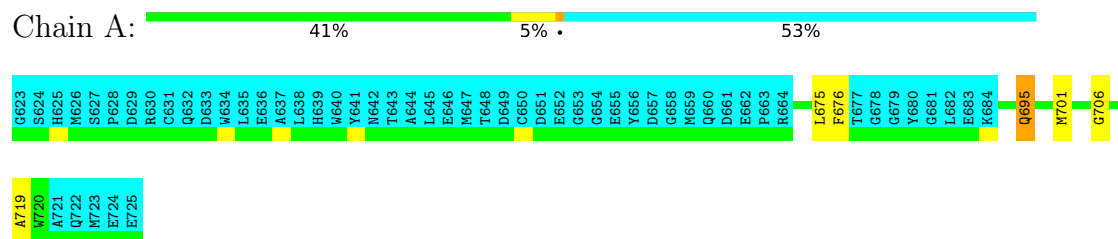
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



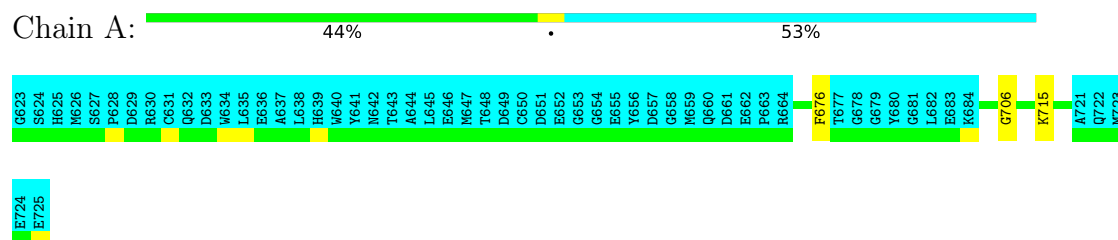
### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



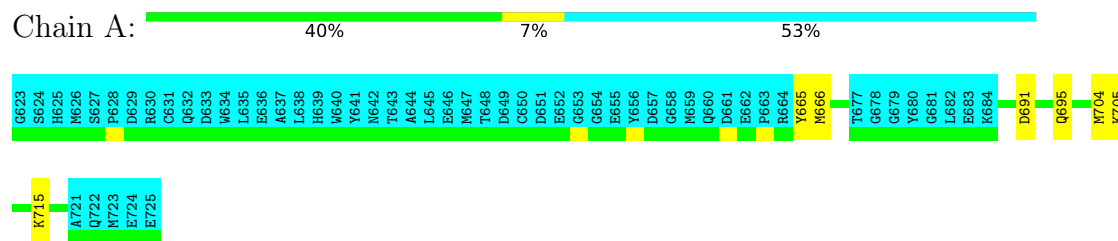
### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



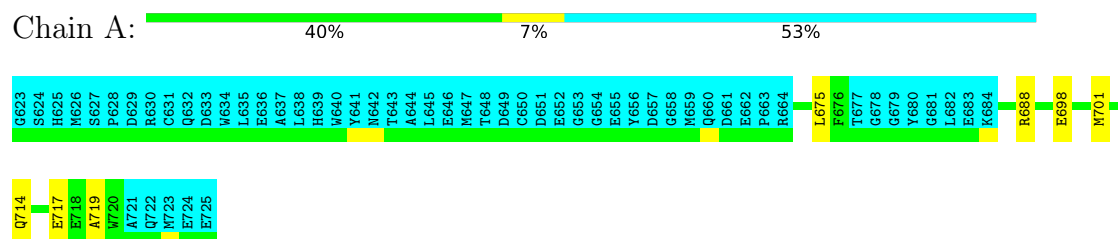
### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



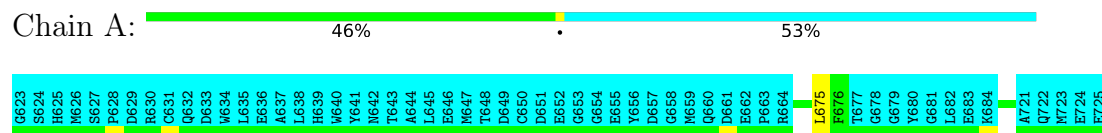
### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



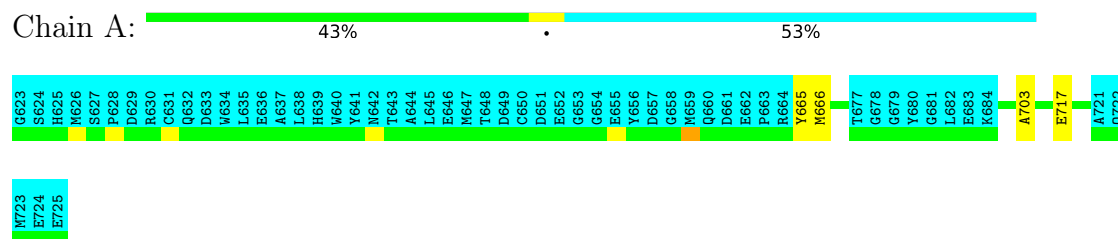
### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



### 4.2.14 Score per residue for model 14

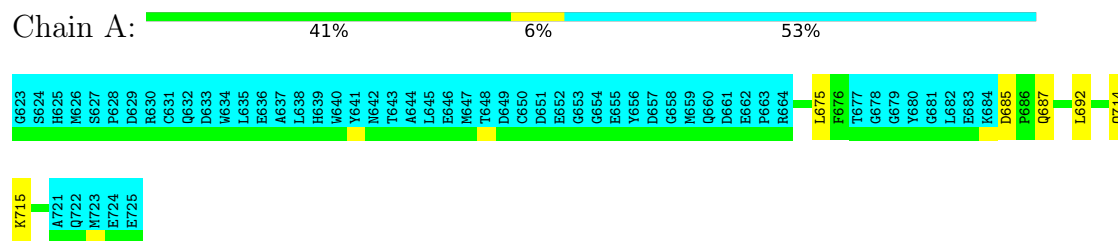
- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase





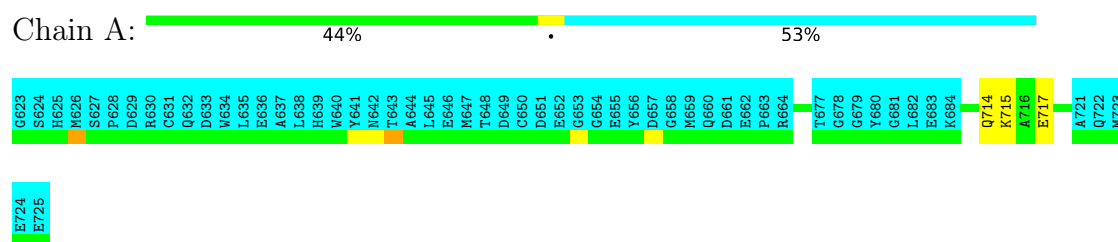
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



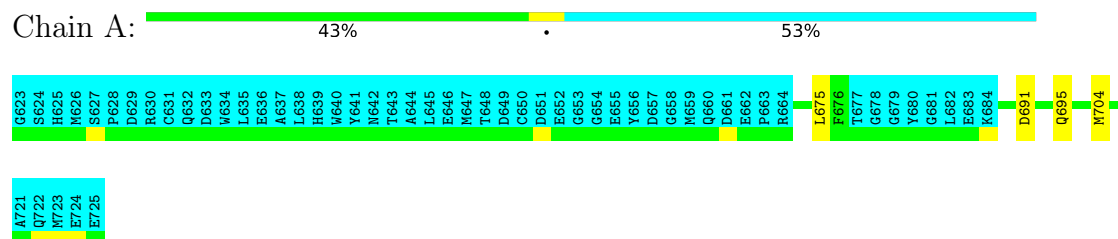
### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



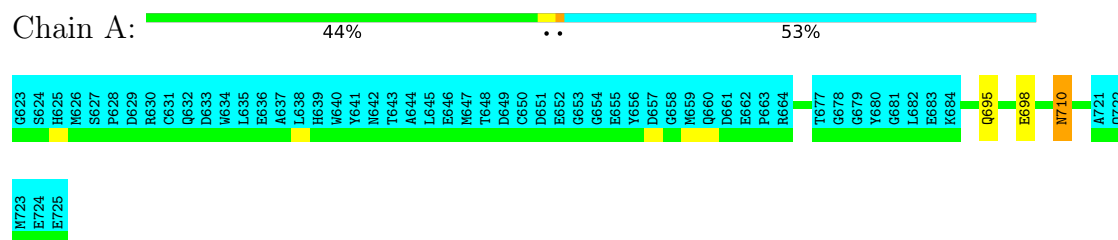
### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



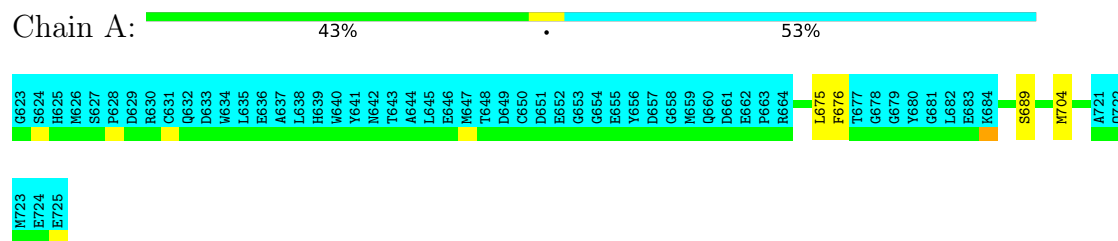
### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



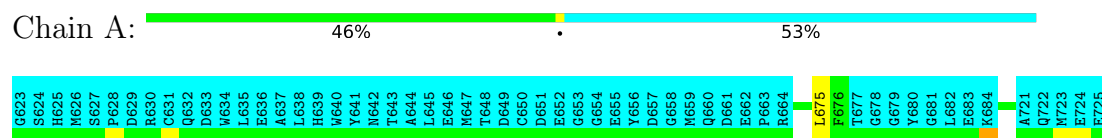
#### 4.2.19 Score per residue for model 19 (medoid)

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 400 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|----------------|---------|
| ARIA          | refinement     |         |

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

|                                              |                |
|----------------------------------------------|----------------|
| Chemical shift file(s)                       | working_cs.cif |
| Number of chemical shift lists               | 1              |
| Total number of shifts                       | 1138           |
| Number of shifts mapped to atoms             | 1138           |
| Number of unparsed shifts                    | 0              |
| Number of shifts with mapping errors         | 0              |
| Number of shifts with mapping warnings       | 0              |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 86%            |

## 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     | 388   | 366      | 366      | 1±1     |
| All | All   | 7760  | 7320     | 7320     | 16      |

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 1.

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

| Atom-1           | Atom-2          | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                 |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:665:TYR:CE2  | 1:A:666:MET:HG3 | 0.53     | 2.39        | 11     | 2     |
| 1:A:665:TYR:OH   | 1:A:705:LYS:HE2 | 0.52     | 2.05        | 8      | 1     |
| 1:A:665:TYR:OH   | 1:A:705:LYS:HE3 | 0.50     | 2.06        | 7      | 1     |
| 1:A:676:PHE:CZ   | 1:A:719:ALA:HA  | 0.50     | 2.41        | 9      | 1     |
| 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:695:GLN:HA  | 0.49     | 1.67        | 9      | 1     |
| 1:A:691:ASP:O    | 1:A:695:GLN:HG2 | 0.48     | 2.08        | 2      | 2     |
| 1:A:691:ASP:O    | 1:A:695:GLN:HG3 | 0.47     | 2.09        | 7      | 2     |
| 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:NH1 | 0.46     | 2.26        | 3      | 1     |
| 1:A:710:ASN:HD22 | 1:A:710:ASN:C   | 0.45     | 2.19        | 18     | 1     |
| 1:A:676:PHE:HB2  | 1:A:689:SER:OG  | 0.43     | 2.13        | 19     | 1     |
| 1:A:698:GLU:O    | 1:A:701:MET:HG2 | 0.43     | 2.13        | 12     | 1     |
| 1:A:670:ARG:O    | 1:A:674:MET:HG3 | 0.42     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:685:ASP:OD2  | 1:A:687:GLN:HB3 | 0.40     | 2.17        | 15     | 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     | 48/103 (47%)   | 47±1 (98±1%) | 1±1 (2±1%) | 0±0 (0±0%) | 100         | 100 |
| All | All   | 960/2060 (47%) | 939 (98%)    | 21 (2%)    | 0 (0%)     | 100         | 100 |

There are no Ramachandran outliers.

### 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     | 36/81 (44%)    | 35±1 (98±2%) | 1±1 (2±2%) | 52          | 92 |
| All | All   | 720/1620 (44%) | 708 (98%)    | 12 (2%)    | 52          | 92 |

All 7 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     | 715 | LYS  | 5              |
| 1   | A     | 695 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 705 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 688 | ARG  | 1              |
| 1   | A     | 692 | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 698 | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 710 | ASN  | 1              |

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

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 86% for the well-defined parts and 85% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: *CS\_calib\_v2*

#### 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                  | 1138 |
| Number of shifts mapped to atoms        | 1138 |
| Number of unparsed shifts               | 0    |
| Number of shifts with mapping errors    | 0    |
| Number of shifts with mapping warnings  | 0    |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 1    |

#### 7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus                | # values | Correction $\pm$ precision, ppm | Suggested action           |
|------------------------|----------|---------------------------------|----------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 101      | $-0.41 \pm 0.22$                | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$  | 93       | $0.46 \pm 0.09$                 | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}'$       | 100      | $-0.30 \pm 0.17$                | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{15}\text{N}$        | 98       | $-0.28 \pm 0.23$                | 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 86%, i.e. 564 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 653. 0 out of 4 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total          | $^1\text{H}$  | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|----------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 240/240 (100%) | 97/97 (100%)  | 96/96 (100%)    | 47/47 (100%)    |
| Sidechain | 293/355 (83%)  | 196/230 (85%) | 92/109 (84%)    | 5/16 (31%)      |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

|          | <b>Total</b>  | <b><sup>1</sup>H</b> | <b><sup>13</sup>C</b> | <b><sup>15</sup>N</b> |
|----------|---------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Aromatic | 31/58 (53%)   | 16/27 (59%)          | 14/30 (47%)           | 1/1 (100%)            |
| Overall  | 564/653 (86%) | 309/354 (87%)        | 202/235 (86%)         | 53/64 (83%)           |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 85%, i.e. 1137 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1337. 0 out of 8 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | <b>Total</b>    | <b><sup>1</sup>H</b> | <b><sup>13</sup>C</b> | <b><sup>15</sup>N</b> |
|-----------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Backbone  | 502/518 (97%)   | 204/212 (96%)        | 201/206 (98%)         | 97/100 (97%)          |
| Sidechain | 566/694 (82%)   | 374/445 (84%)        | 184/222 (83%)         | 8/27 (30%)            |
| Aromatic  | 69/125 (55%)    | 35/59 (59%)          | 31/59 (53%)           | 3/7 (43%)             |
| Overall   | 1137/1337 (85%) | 613/716 (86%)        | 416/487 (85%)         | 108/134 (81%)         |

#### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

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.

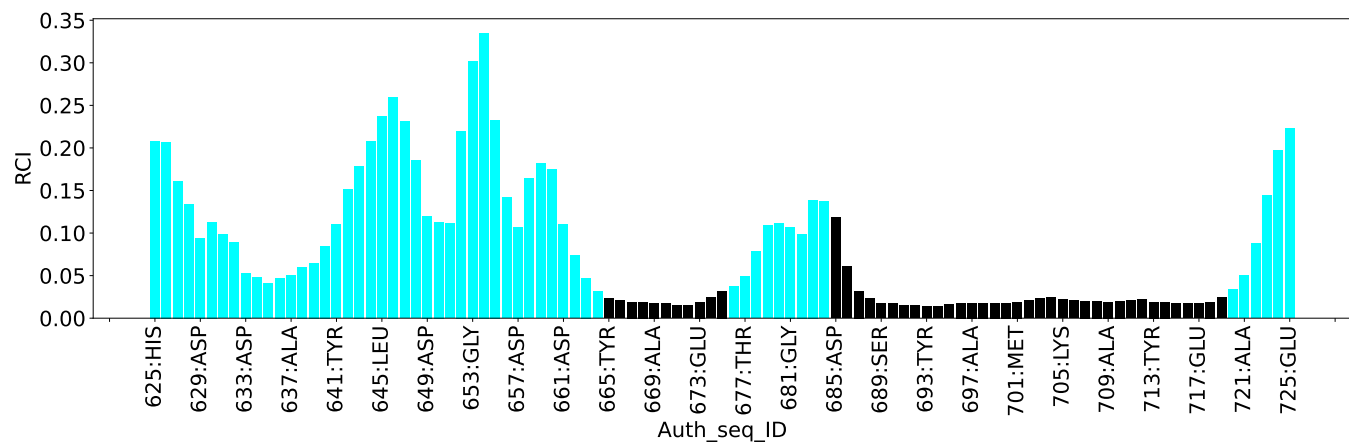
| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1       | A     | 715 | LYS  | HB3  | 0.16       | 0.46 – 3.04         | -6.2    |

#### 7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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

Random coil index (RCI) for chain A:





## 8 NMR restraints analysis

### 8.1 Conformationally restricting restraints

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

| Description                                              | Value |
|----------------------------------------------------------|-------|
| Total distance restraints                                | 1663  |
| Intra-residue ( $ i-j =0$ )                              | 610   |
| Sequential ( $ i-j =1$ )                                 | 401   |
| Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )                 | 361   |
| Long range ( $ i-j \geq 5$ )                             | 291   |
| Inter-chain                                              | 0     |
| Hydrogen bond restraints                                 | 0     |
| Disulfide bond restraints                                | 0     |
| Total dihedral-angle restraints                          | 683   |
| Number of unmapped restraints                            | 0     |
| Number of restraints per residue                         | 22.8  |
| Number of long range restraints per residue <sup>1</sup> | 2.8   |

<sup>1</sup>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

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

#### 8.2.1 Average number of distance violations per model

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

| Bins (Å)         | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|----------------------------------------|---------|
| 0.1-0.2 (Small)  | 19.2                                   | 0.2     |
| 0.2-0.5 (Medium) | 44.5                                   | 0.5     |
| >0.5 (Large)     | 78.5                                   | 6.46    |

### 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)   | 84.0                                   | 10.0    |
| 10.0-20.0 (Medium) | 46.4                                   | 19.99   |
| >20.0 (Large)      | 275.9                                  | 125.66  |

## 9 Distance violation analysis ⓘ

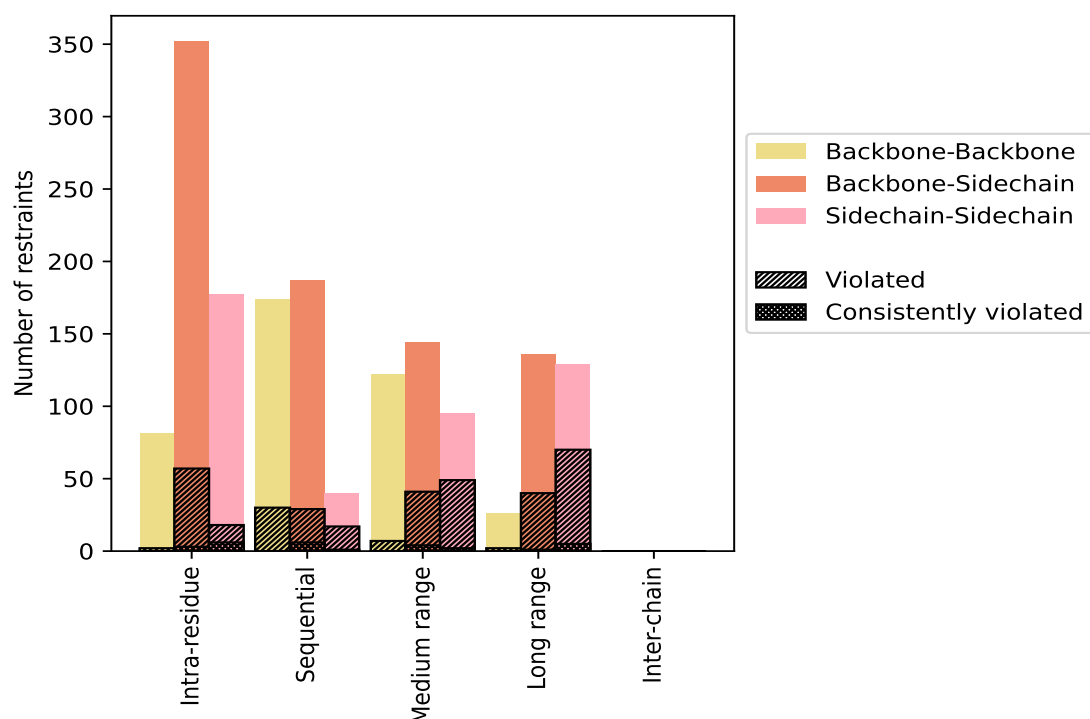
### 9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

| Restrains type                                                              | Count       | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|-----------------------------------------------------------------------------|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|                                                                             |             |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| <b>Intra-residue (<math> i-j =0</math>)</b>                                 | <b>610</b>  | <b>36.7</b>    | <b>77</b>             | <b>12.6</b>    | <b>4.6</b>     | <b>9</b>                           | <b>1.5</b>     | <b>0.5</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 81          | 4.9            | 2                     | 2.5            | 0.1            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 352         | 21.2           | 57                    | 16.2           | 3.4            | 3                                  | 0.9            | 0.2            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 177         | 10.6           | 18                    | 10.2           | 1.1            | 6                                  | 3.4            | 0.4            |
| <b>Sequential (<math> i-j =1</math>)</b>                                    | <b>401</b>  | <b>24.1</b>    | <b>76</b>             | <b>19.0</b>    | <b>4.6</b>     | <b>7</b>                           | <b>1.7</b>     | <b>0.4</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 174         | 10.5           | 30                    | 17.2           | 1.8            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 187         | 11.2           | 29                    | 15.5           | 1.7            | 6                                  | 3.2            | 0.4            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 40          | 2.4            | 17                    | 42.5           | 1.0            | 1                                  | 2.5            | 0.1            |
| <b>Medium range (<math> i-j &gt;1</math> &amp; <math> i-j &lt;5</math>)</b> | <b>361</b>  | <b>21.7</b>    | <b>97</b>             | <b>26.9</b>    | <b>5.8</b>     | <b>6</b>                           | <b>1.7</b>     | <b>0.4</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 122         | 7.3            | 7                     | 5.7            | 0.4            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 144         | 8.7            | 41                    | 28.5           | 2.5            | 4                                  | 2.8            | 0.2            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 95          | 5.7            | 49                    | 51.6           | 2.9            | 2                                  | 2.1            | 0.1            |
| <b>Long range (<math> i-j \geq 5</math>)</b>                                | <b>291</b>  | <b>17.5</b>    | <b>112</b>            | <b>38.5</b>    | <b>6.7</b>     | <b>6</b>                           | <b>2.1</b>     | <b>0.4</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 26          | 1.6            | 2                     | 7.7            | 0.1            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 136         | 8.2            | 40                    | 29.4           | 2.4            | 1                                  | 0.7            | 0.1            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 129         | 7.8            | 70                    | 54.3           | 4.2            | 5                                  | 3.9            | 0.3            |
| <b>Inter-chain</b>                                                          | <b>0</b>    | <b>0.0</b>     | <b>0</b>              | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| 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            |
| <b>Hydrogen bond</b>                                                        | <b>0</b>    | <b>0.0</b>     | <b>0</b>              | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| <b>Disulfide bond</b>                                                       | <b>0</b>    | <b>0.0</b>     | <b>0</b>              | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| <b>Total</b>                                                                | <b>1663</b> | <b>100.0</b>   | <b>362</b>            | <b>21.8</b>    | <b>21.8</b>    | <b>28</b>                          | <b>1.7</b>     | <b>1.7</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 403         | 24.2           | 41                    | 10.2           | 2.5            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 819         | 49.2           | 167                   | 20.4           | 10.0           | 14                                 | 1.7            | 0.8            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 441         | 26.5           | 154                   | 34.9           | 9.3            | 14                                 | 3.2            | 0.8            |

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> 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 <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total |          |         |                     |            |
| 1        | 35                   | 26              | 47              | 34              | 0               | 142   | 0.83     | 3.57    | 0.67                | 0.58       |
| 2        | 30                   | 31              | 40              | 36              | 0               | 137   | 0.76     | 4.04    | 0.7                 | 0.54       |
| 3        | 32                   | 29              | 34              | 45              | 0               | 140   | 0.73     | 2.67    | 0.6                 | 0.55       |
| 4        | 27                   | 32              | 43              | 46              | 0               | 148   | 0.86     | 4.91    | 0.81                | 0.55       |
| 5        | 31                   | 33              | 36              | 47              | 0               | 147   | 0.78     | 3.26    | 0.67                | 0.58       |
| 6        | 29                   | 35              | 47              | 54              | 0               | 165   | 0.93     | 4.97    | 0.84                | 0.63       |
| 7        | 27                   | 32              | 35              | 39              | 0               | 133   | 0.76     | 2.9     | 0.64                | 0.53       |
| 8        | 30                   | 28              | 44              | 45              | 0               | 147   | 0.82     | 3.61    | 0.73                | 0.59       |
| 9        | 28                   | 39              | 36              | 39              | 0               | 142   | 0.71     | 2.64    | 0.55                | 0.52       |
| 10       | 27                   | 33              | 38              | 43              | 0               | 141   | 0.82     | 3.94    | 0.75                | 0.52       |

*Continued on next page...*

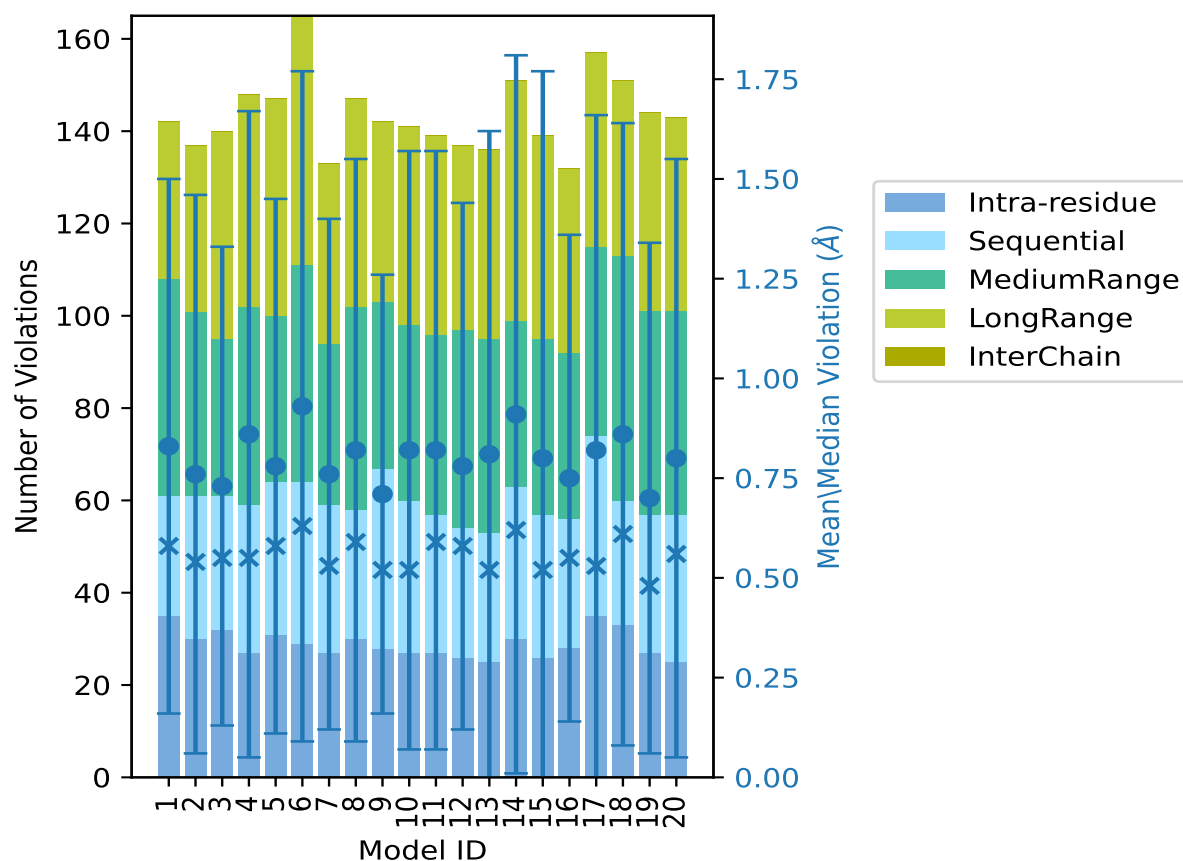
Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations |                 |                 |                 |                 |       | Mean (Å) | Max (Å) | SD <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total |          |         |                     |            |
| 11       | 27                   | 30              | 39              | 43              | 0               | 139   | 0.82     | 4.74    | 0.75                | 0.59       |
| 12       | 26                   | 28              | 43              | 40              | 0               | 137   | 0.78     | 3.47    | 0.66                | 0.58       |
| 13       | 25                   | 28              | 42              | 41              | 0               | 136   | 0.81     | 4.67    | 0.81                | 0.52       |
| 14       | 30                   | 33              | 36              | 52              | 0               | 151   | 0.91     | 6.46    | 0.9                 | 0.62       |
| 15       | 26                   | 31              | 38              | 44              | 0               | 139   | 0.8      | 5.95    | 0.97                | 0.52       |
| 16       | 28                   | 28              | 36              | 40              | 0               | 132   | 0.75     | 2.86    | 0.61                | 0.55       |
| 17       | 35                   | 39              | 41              | 42              | 0               | 157   | 0.82     | 5.64    | 0.84                | 0.53       |
| 18       | 33                   | 27              | 53              | 38              | 0               | 151   | 0.86     | 3.67    | 0.78                | 0.61       |
| 19       | 27                   | 30              | 44              | 43              | 0               | 144   | 0.7      | 4.05    | 0.64                | 0.48       |
| 20       | 25                   | 32              | 44              | 42              | 0               | 143   | 0.8      | 4.04    | 0.75                | 0.56       |

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>Standard deviation

### 9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model ⓘ



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

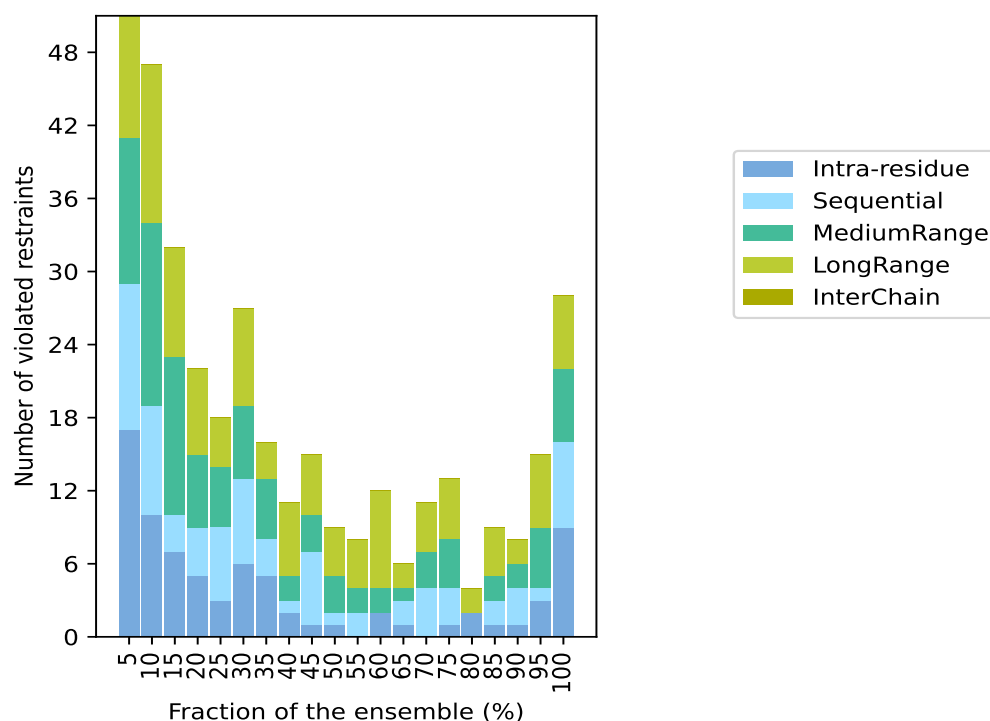
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1301(IR:533, SQ:325, MR:264, LR:179, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints |                 |                 |                 |                 |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR <sup>1</sup>               | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total | Count <sup>6</sup>       | %     |
| 17                            | 12              | 12              | 10              | 0               | 51    | 1                        | 5.0   |
| 10                            | 9               | 15              | 13              | 0               | 47    | 2                        | 10.0  |
| 7                             | 3               | 13              | 9               | 0               | 32    | 3                        | 15.0  |
| 5                             | 4               | 6               | 7               | 0               | 22    | 4                        | 20.0  |
| 3                             | 6               | 5               | 4               | 0               | 18    | 5                        | 25.0  |
| 6                             | 7               | 6               | 8               | 0               | 27    | 6                        | 30.0  |
| 5                             | 3               | 5               | 3               | 0               | 16    | 7                        | 35.0  |
| 2                             | 1               | 2               | 6               | 0               | 11    | 8                        | 40.0  |
| 1                             | 6               | 3               | 5               | 0               | 15    | 9                        | 45.0  |
| 1                             | 1               | 3               | 4               | 0               | 9     | 10                       | 50.0  |
| 0                             | 2               | 2               | 4               | 0               | 8     | 11                       | 55.0  |
| 2                             | 0               | 2               | 8               | 0               | 12    | 12                       | 60.0  |
| 1                             | 2               | 1               | 2               | 0               | 6     | 13                       | 65.0  |
| 0                             | 4               | 3               | 4               | 0               | 11    | 14                       | 70.0  |
| 1                             | 3               | 4               | 5               | 0               | 13    | 15                       | 75.0  |
| 2                             | 0               | 0               | 2               | 0               | 4     | 16                       | 80.0  |
| 1                             | 2               | 2               | 4               | 0               | 9     | 17                       | 85.0  |
| 1                             | 3               | 2               | 2               | 0               | 8     | 18                       | 90.0  |
| 3                             | 1               | 5               | 6               | 0               | 15    | 19                       | 95.0  |
| 9                             | 7               | 6               | 6               | 0               | 28    | 20                       | 100.0 |

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup> Number of models with violations

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

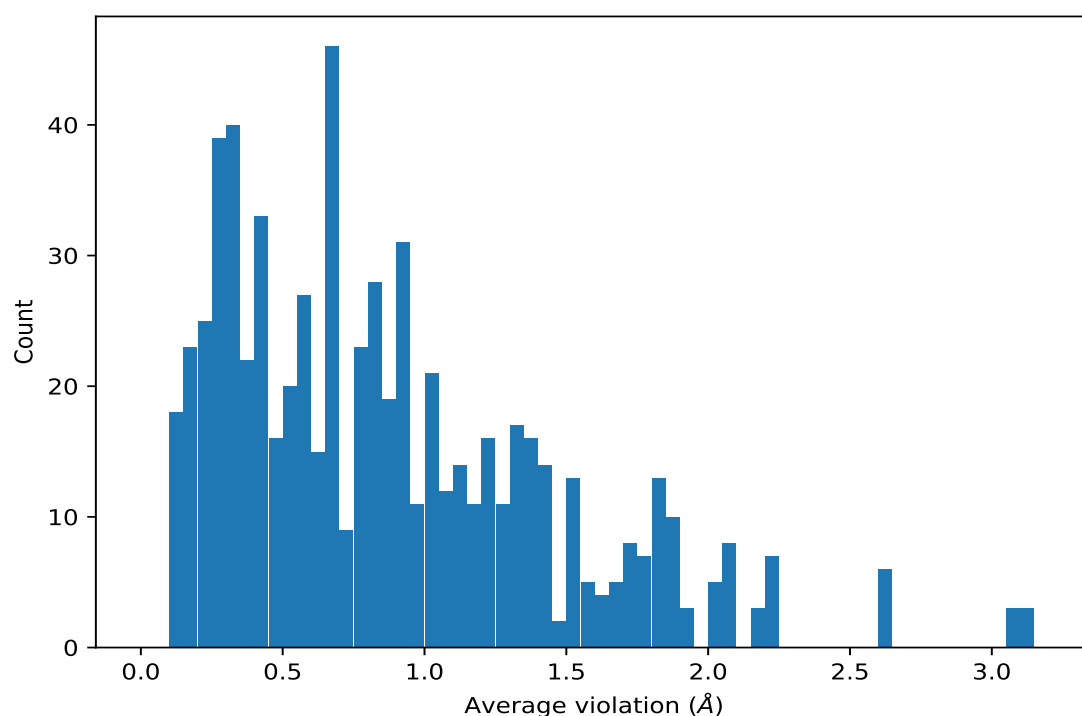


## 9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [i](#)

### 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 <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2 | 1:677:A:THR:HG21 | 20                  | 2.01     | 0.51                | 1.98       |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2 | 1:677:A:THR:HG22 | 20                  | 2.01     | 0.51                | 1.98       |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2 | 1:677:A:THR:HG23 | 20                  | 2.01     | 0.51                | 1.98       |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB3 | 1:711:A:GLN:HG3  | 20                  | 1.87     | 0.93                | 1.23       |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB3 | 1:714:A:GLN:HB2  | 20                  | 1.87     | 0.93                | 1.23       |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB2 | 1:714:A:GLN:HB2  | 20                  | 1.87     | 0.93                | 1.23       |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB1 | 1:714:A:GLN:HB2  | 20                  | 1.87     | 0.93                | 1.23       |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB2 | 1:711:A:GLN:HG3  | 20                  | 1.87     | 0.93                | 1.23       |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB1 | 1:711:A:GLN:HG3  | 20                  | 1.87     | 0.93                | 1.23       |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA  | 1:663:A:PRO:HG3  | 20                  | 1.62     | 0.11                | 1.6        |
| (3,55)  | 1:724:A:GLU:HG2 | 1:725:A:GLU:HA   | 20                  | 1.5      | 0.67                | 1.58       |
| (3,55)  | 1:683:A:GLU:HG2 | 1:684:A:LYS:HA   | 20                  | 1.5      | 0.67                | 1.58       |
| (1,289) | 1:671:A:GLU:HB2 | 1:692:A:LEU:HD23 | 20                  | 1.42     | 0.7                 | 1.17       |
| (1,289) | 1:671:A:GLU:HB2 | 1:692:A:LEU:HD21 | 20                  | 1.42     | 0.7                 | 1.17       |
| (1,289) | 1:671:A:GLU:HB2 | 1:692:A:LEU:HD22 | 20                  | 1.42     | 0.7                 | 1.17       |
| (3,91)  | 1:669:A:ALA:HB1 | 1:667:A:MET:HB2  | 20                  | 1.36     | 0.09                | 1.38       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HB2  | 20                  | 1.36     | 0.09                | 1.38       |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 20                  | 1.36     | 0.09                | 1.38       |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:667:A:MET:HB2  | 20                  | 1.36     | 0.09                | 1.38       |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 20                  | 1.24     | 0.74                | 1.27       |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE1  | 20                  | 1.24     | 0.74                | 1.27       |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE3  | 20                  | 1.24     | 0.74                | 1.27       |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 20                  | 1.14     | 0.34                | 1.11       |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 20                  | 1.08     | 0.16                | 1.13       |
| (3,104)  | 1:673:A:GLU:HA   | 1:692:A:LEU:HD23 | 20                  | 1.08     | 0.16                | 1.13       |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 20                  | 1.03     | 0.8                 | 0.84       |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 20                  | 1.03     | 0.8                 | 0.84       |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 20                  | 1.03     | 0.8                 | 0.84       |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:692:A:LEU:HB2  | 20                  | 0.97     | 0.47                | 1.24       |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 20                  | 0.97     | 0.47                | 1.24       |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:692:A:LEU:HB2  | 20                  | 0.97     | 0.47                | 1.24       |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 20                  | 0.87     | 0.04                | 0.86       |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 20                  | 0.82     | 0.12                | 0.82       |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG22 | 20                  | 0.82     | 0.12                | 0.82       |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 20                  | 0.82     | 0.12                | 0.82       |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 20                  | 0.8      | 0.2                 | 0.82       |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HB2  | 20                  | 0.8      | 0.2                 | 0.82       |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HB2  | 20                  | 0.8      | 0.2                 | 0.82       |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HB2  | 20                  | 0.8      | 0.2                 | 0.82       |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 20                  | 0.8      | 0.2                 | 0.82       |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HB2  | 20                  | 0.8      | 0.2                 | 0.82       |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 20                  | 0.78     | 0.08                | 0.78       |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB3  | 20                  | 0.78     | 0.08                | 0.78       |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 20                  | 0.78     | 0.08                | 0.78       |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 20                  | 0.65     | 0.09                | 0.68       |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 20                  | 0.6      | 0.11                | 0.62       |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 20                  | 0.6      | 0.11                | 0.62       |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 20                  | 0.6      | 0.11                | 0.62       |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HA   | 20                  | 0.57     | 0.03                | 0.58       |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 20                  | 0.57     | 0.03                | 0.58       |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HA   | 20                  | 0.57     | 0.03                | 0.58       |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 20                  | 0.54     | 0.04                | 0.53       |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 20                  | 0.52     | 0.02                | 0.52       |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (3,63)   | 1:701:A:MET:HG2  | 1:701:A:MET:HB2  | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 20                  | 0.43     | 0.02                | 0.43       |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:682:A:LEU:HG   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,79)  | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:682:A:LEU:HG   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (3,79)  | 1:645:A:LEU:HD12 | 1:645:A:LEU:HG   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (3,79)  | 1:645:A:LEU:HD13 | 1:645:A:LEU:HG   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,322) | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 20                  | 0.34     | 0.12                | 0.29       |
| (1,322) | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 20                  | 0.34     | 0.12                | 0.29       |
| (1,322) | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 20                  | 0.34     | 0.12                | 0.29       |
| (3,82)  | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD21 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (3,82)  | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD22 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (3,82)  | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD22 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (3,82)  | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD23 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (3,82)  | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD23 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (3,82)  | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD21 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,780) | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 20                  | 0.2      | 0.05                | 0.2        |
| (1,429) | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,429) | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,429) | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:708:A:LEU:HG   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 20                  | 0.17     | 0.02                | 0.18       |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG21 | 20                  | 0.17     | 0.02                | 0.18       |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG22 | 1:643:A:THR:HB   | 20                  | 0.17     | 0.02                | 0.18       |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG22 | 20                  | 0.17     | 0.02                | 0.18       |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG23 | 1:643:A:THR:HB   | 20                  | 0.17     | 0.02                | 0.18       |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG21 | 1:643:A:THR:HB   | 20                  | 0.17     | 0.02                | 0.18       |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 19                  | 2.6      | 0.28                | 2.53       |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:692:A:LEU:HG   | 19                  | 2.6      | 0.28                | 2.53       |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:700:A:ALA:HB2  | 19                  | 2.6      | 0.28                | 2.53       |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:668:A:LEU:HB3  | 19                  | 2.6      | 0.28                | 2.53       |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:692:A:LEU:HG   | 19                  | 2.6      | 0.28                | 2.53       |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:668:A:LEU:HB3  | 19                  | 2.6      | 0.28                | 2.53       |
| (1,207) | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 19                  | 1.3      | 0.13                | 1.29       |
| (1,489) | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HG3  | 19                  | 0.93     | 0.67                | 0.78       |
| (1,489) | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HG3  | 19                  | 0.93     | 0.67                | 0.78       |
| (1,489) | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 19                  | 0.93     | 0.67                | 0.78       |
| (1,887) | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 19                  | 0.78     | 0.01                | 0.78       |
| (1,311) | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 19                  | 0.77     | 0.37                | 0.78       |
| (1,311) | 1:703:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HB3  | 19                  | 0.77     | 0.37                | 0.78       |
| (1,311) | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 19                  | 0.77     | 0.37                | 0.78       |
| (1,726) | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 19                  | 0.72     | 0.34                | 0.93       |
| (1,151) | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 19                  | 0.65     | 0.28                | 0.61       |
| (1,246) | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HB2  | 19                  | 0.53     | 0.36                | 0.49       |
| (1,246) | 1:692:A:LEU:HD12 | 1:671:A:GLU:HB2  | 19                  | 0.53     | 0.36                | 0.49       |
| (1,246) | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 19                  | 0.53     | 0.36                | 0.49       |
| (1,506) | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 19                  | 0.49     | 0.18                | 0.43       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,506) | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HA   | 19                  | 0.49     | 0.18                | 0.43       |
| (1,506) | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 19                  | 0.49     | 0.18                | 0.43       |
| (3,221) | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 19                  | 0.45     | 0.13                | 0.46       |
| (3,221) | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 19                  | 0.45     | 0.13                | 0.46       |
| (3,372) | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 19                  | 0.43     | 0.11                | 0.44       |
| (1,866) | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 19                  | 0.42     | 0.16                | 0.43       |
| (1,711) | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 19                  | 0.32     | 0.08                | 0.36       |
| (1,711) | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 19                  | 0.32     | 0.08                | 0.36       |
| (1,711) | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 19                  | 0.32     | 0.08                | 0.36       |
| (3,248) | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG2  | 19                  | 0.31     | 0.04                | 0.3        |
| (3,248) | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 19                  | 0.31     | 0.04                | 0.3        |
| (1,591) | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 19                  | 0.16     | 0.01                | 0.16       |
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 18                  | 1.43     | 0.27                | 1.48       |
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HB2  | 18                  | 1.43     | 0.27                | 1.48       |
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HB2  | 18                  | 1.43     | 0.27                | 1.48       |
| (1,333) | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:715:A:LYS:HD2  | 18                  | 1.21     | 0.35                | 1.3        |
| (1,333) | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 18                  | 1.21     | 0.35                | 1.3        |
| (1,333) | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:715:A:LYS:HD2  | 18                  | 1.21     | 0.35                | 1.3        |
| (1,497) | 1:666:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 18                  | 1.21     | 0.83                | 1.13       |
| (1,497) | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 18                  | 1.21     | 0.83                | 1.13       |
| (1,497) | 1:666:A:MET:HE3  | 1:663:A:PRO:HA   | 18                  | 1.21     | 0.83                | 1.13       |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 18                  | 1.01     | 0.41                | 1.02       |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 18                  | 1.01     | 0.41                | 1.02       |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 18                  | 1.01     | 0.41                | 1.02       |
| (1,868) | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 18                  | 0.57     | 0.09                | 0.59       |
| (1,666) | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 18                  | 0.41     | 0.04                | 0.42       |
| (3,94)  | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:714:A:GLN:HB2  | 18                  | 0.22     | 0.07                | 0.2        |
| (3,94)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 18                  | 0.22     | 0.07                | 0.2        |
| (3,94)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 18                  | 0.22     | 0.07                | 0.2        |
| (3,287) | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 18                  | 0.19     | 0.02                | 0.2        |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 17                  | 1.84     | 1.16                | 1.24       |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 17                  | 1.84     | 1.16                | 1.24       |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 17                  | 1.84     | 1.16                | 1.24       |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 17                  | 1.6      | 0.87                | 1.55       |
| (3,87)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 17                  | 1.29     | 0.69                | 1.66       |
| (3,87)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HE2  | 17                  | 1.29     | 0.69                | 1.66       |
| (3,87)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 17                  | 1.29     | 0.69                | 1.66       |
| (3,87)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HE2  | 17                  | 1.29     | 0.69                | 1.66       |
| (3,87)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HE2  | 17                  | 1.29     | 0.69                | 1.66       |
| (3,87)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB3  | 17                  | 1.29     | 0.69                | 1.66       |
| (1,377) | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,377) | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:708:A:LEU:HD11 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1 | 1:708:A:LEU:HD11 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB3 | 1:708:A:LEU:HD13 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1 | 1:708:A:LEU:HD12 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB2 | 1:708:A:LEU:HD13 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB3 | 1:708:A:LEU:HD12 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1 | 1:708:A:LEU:HD13 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB2 | 1:708:A:LEU:HD11 | 17                  | 0.7      | 0.22                | 0.68       |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2 | 1:645:A:LEU:HD22 | 17                  | 0.62     | 0.02                | 0.63       |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2 | 1:645:A:LEU:HD23 | 17                  | 0.62     | 0.02                | 0.63       |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2 | 1:645:A:LEU:HD21 | 17                  | 0.62     | 0.02                | 0.63       |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB3 | 1:712:A:TYR:HD2  | 17                  | 0.6      | 0.22                | 0.57       |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB2 | 1:712:A:TYR:HD2  | 17                  | 0.6      | 0.22                | 0.57       |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB1 | 1:712:A:TYR:HD2  | 17                  | 0.6      | 0.22                | 0.57       |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H   | 1:703:A:ALA:HA   | 17                  | 0.54     | 0.18                | 0.55       |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2 | 1:711:A:GLN:HB2  | 17                  | 0.51     | 0.21                | 0.46       |
| (3,147)  | 1:636:A:GLU:HB2 | 1:706:A:GLY:HA2  | 17                  | 0.51     | 0.21                | 0.46       |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H   | 1:718:A:GLU:HB2  | 17                  | 0.29     | 0.06                | 0.28       |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2 | 1:708:A:LEU:HD12 | 16                  | 0.71     | 0.01                | 0.71       |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2 | 1:708:A:LEU:HD11 | 16                  | 0.71     | 0.01                | 0.71       |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2 | 1:708:A:LEU:HD13 | 16                  | 0.71     | 0.01                | 0.71       |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE1 | 1:682:A:LEU:HD22 | 16                  | 0.67     | 0.74                | 0.4        |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE1 | 1:682:A:LEU:HD23 | 16                  | 0.67     | 0.74                | 0.4        |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE2 | 1:682:A:LEU:HD22 | 16                  | 0.67     | 0.74                | 0.4        |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3 | 1:682:A:LEU:HD22 | 16                  | 0.67     | 0.74                | 0.4        |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE2 | 1:682:A:LEU:HD21 | 16                  | 0.67     | 0.74                | 0.4        |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE1 | 1:682:A:LEU:HD21 | 16                  | 0.67     | 0.74                | 0.4        |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3 | 1:682:A:LEU:HD23 | 16                  | 0.67     | 0.74                | 0.4        |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H   | 1:675:A:LEU:HD22 | 16                  | 0.32     | 0.09                | 0.32       |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H   | 1:675:A:LEU:HD21 | 16                  | 0.32     | 0.09                | 0.32       |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H   | 1:675:A:LEU:HD23 | 16                  | 0.32     | 0.09                | 0.32       |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA  | 1:682:A:LEU:HD23 | 16                  | 0.23     | 0.08                | 0.24       |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA  | 1:682:A:LEU:HD22 | 16                  | 0.23     | 0.08                | 0.24       |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA  | 1:682:A:LEU:HD21 | 16                  | 0.23     | 0.08                | 0.24       |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE2 | 1:705:A:LYS:HE2  | 15                  | 1.79     | 0.89                | 1.49       |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE1 | 1:705:A:LYS:HE2  | 15                  | 1.79     | 0.89                | 1.49       |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE3 | 1:705:A:LYS:HE2  | 15                  | 1.79     | 0.89                | 1.49       |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2 | 1:663:A:PRO:HB3  | 15                  | 1.37     | 0.67                | 1.43       |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE3 | 1:670:A:ARG:HD2  | 15                  | 0.99     | 0.69                | 0.96       |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1 | 1:670:A:ARG:HD2  | 15                  | 0.99     | 0.69                | 0.96       |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE2 | 1:670:A:ARG:HD2  | 15                  | 0.99     | 0.69                | 0.96       |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE1 | 1:668:A:LEU:HD11 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE3 | 1:668:A:LEU:HD11 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD13 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:668:A:LEU:HD12 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:668:A:LEU:HD13 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD11 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:668:A:LEU:HD13 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD12 | 15                  | 0.8      | 0.75                | 0.47       |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HG3  | 15                  | 0.79     | 0.16                | 0.82       |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HG3  | 15                  | 0.79     | 0.16                | 0.82       |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HG3  | 15                  | 0.79     | 0.16                | 0.82       |
| (3,28)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HB2  | 15                  | 0.75     | 0.68                | 0.6        |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 15                  | 0.75     | 0.68                | 0.6        |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 15                  | 0.58     | 0.21                | 0.67       |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB1  | 15                  | 0.58     | 0.21                | 0.67       |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB3  | 15                  | 0.58     | 0.21                | 0.67       |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 15                  | 0.46     | 0.18                | 0.46       |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD21 | 15                  | 0.44     | 0.14                | 0.44       |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD23 | 15                  | 0.44     | 0.14                | 0.44       |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD22 | 15                  | 0.44     | 0.14                | 0.44       |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 15                  | 0.35     | 0.17                | 0.29       |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HA   | 15                  | 0.35     | 0.17                | 0.29       |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:635:A:LEU:HA   | 15                  | 0.35     | 0.17                | 0.29       |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 15                  | 0.34     | 0.18                | 0.28       |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 15                  | 0.34     | 0.18                | 0.28       |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 15                  | 0.34     | 0.18                | 0.28       |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 15                  | 0.34     | 0.18                | 0.28       |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 15                  | 0.31     | 0.09                | 0.33       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB3  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB2  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB1  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:716:A:ALA:HB2  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:716:A:ALA:HB2  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:716:A:ALA:HB3  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:716:A:ALA:HB3  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:716:A:ALA:HB1  | 15                  | 0.28     | 0.14                | 0.24       |
| (1,520)  | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 14                  | 2.15     | 0.43                | 2.36       |
| (1,520)  | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 14                  | 2.15     | 0.43                | 2.36       |
| (1,520)  | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD22 | 14                  | 2.15     | 0.43                | 2.36       |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 14                  | 1.84     | 1.22                | 1.18       |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HG3  | 14                  | 1.84     | 1.22                | 1.18       |
| (3,13)   | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD12 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |
| (3,13)   | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD11 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |
| (3,13)   | 1:702:A:GLU:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,13)  | 1:695:A:GLN:HA   | 1:692:A:LEU:HD11 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |
| (3,13)  | 1:695:A:GLN:HA   | 1:692:A:LEU:HD13 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD13 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |
| (3,13)  | 1:695:A:GLN:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 14                  | 1.73     | 0.98                | 1.73       |
| (1,104) | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 14                  | 1.64     | 1.32                | 1.21       |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:638:A:LEU:HA   | 14                  | 1.5      | 0.75                | 1.62       |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:638:A:LEU:HA   | 14                  | 1.5      | 0.75                | 1.62       |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:638:A:LEU:HA   | 14                  | 1.5      | 0.75                | 1.62       |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:637:A:ALA:HA   | 14                  | 1.5      | 0.75                | 1.62       |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE3  | 14                  | 1.23     | 0.99                | 1.44       |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE1  | 14                  | 1.23     | 0.99                | 1.44       |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE2  | 14                  | 1.23     | 0.99                | 1.44       |
| (2,2)   | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 14                  | 1.22     | 0.41                | 1.12       |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:665:A:TYR:HB3  | 14                  | 1.12     | 0.41                | 1.18       |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:665:A:TYR:HB3  | 14                  | 1.12     | 0.41                | 1.18       |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:705:A:LYS:HE2  | 14                  | 1.12     | 0.41                | 1.18       |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:665:A:TYR:HB3  | 14                  | 1.12     | 0.41                | 1.18       |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:705:A:LYS:HE2  | 14                  | 1.12     | 0.41                | 1.18       |
| (1,660) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 14                  | 0.51     | 0.13                | 0.55       |
| (1,709) | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 14                  | 0.49     | 0.06                | 0.5        |
| (1,392) | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 14                  | 0.42     | 0.15                | 0.42       |
| (1,392) | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:691:A:ASP:HB2  | 14                  | 0.42     | 0.15                | 0.42       |
| (1,392) | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:691:A:ASP:HB2  | 14                  | 0.42     | 0.15                | 0.42       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD12 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD12 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD13 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD13 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD22 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD21 | 13                  | 2.07     | 0.99                | 2.56       |
| (1,701) | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 13                  | 0.49     | 0.14                | 0.51       |
| (3,125) | 1:684:A:LYS:HG3  | 1:689:A:SER:HB2  | 13                  | 0.4      | 0.18                | 0.4        |
| (3,125) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:714:A:GLN:HA   | 13                  | 0.4      | 0.18                | 0.4        |
| (3,125) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:689:A:SER:HB2  | 13                  | 0.4      | 0.18                | 0.4        |
| (1,74)  | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 13                  | 0.22     | 0.09                | 0.2        |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB3  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:672:A:ALA:HB2  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:672:A:ALA:HB2  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB1  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB2  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:672:A:ALA:HB1  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:672:A:ALA:HB1  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:672:A:ALA:HB3  | 13                  | 0.22     | 0.07                | 0.21       |
| (1,859) | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 13                  | 0.17     | 0.04                | 0.17       |
| (3,61)  | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 12                  | 1.9      | 0.84                | 1.86       |
| (3,61)  | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HE2  | 12                  | 1.9      | 0.84                | 1.86       |
| (1,349) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE3  | 12                  | 1.66     | 0.9                 | 1.6        |
| (1,349) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE1  | 12                  | 1.66     | 0.9                 | 1.6        |
| (1,349) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE2  | 12                  | 1.66     | 0.9                 | 1.6        |
| (1,524) | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:706:A:GLY:HA3  | 12                  | 1.43     | 1.13                | 1.04       |
| (1,524) | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:706:A:GLY:HA3  | 12                  | 1.43     | 1.13                | 1.04       |
| (1,524) | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:706:A:GLY:HA3  | 12                  | 1.43     | 1.13                | 1.04       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:648:A:THR:HG21 | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:648:A:THR:HG23 | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:643:A:THR:HG22 | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HG   | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:648:A:THR:HG22 | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HG   | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:635:A:LEU:HG   | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:648:A:THR:HG23 | 12                  | 1.31     | 0.77                | 1.27       |
| (1,71)  | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 12                  | 0.97     | 0.75                | 0.78       |
| (1,979) | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 12                  | 0.7      | 0.02                | 0.7        |
| (3,52)  | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD22 | 12                  | 0.64     | 0.45                | 0.54       |
| (3,52)  | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD12 | 12                  | 0.64     | 0.45                | 0.54       |
| (3,52)  | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD13 | 12                  | 0.64     | 0.45                | 0.54       |
| (3,52)  | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD21 | 12                  | 0.64     | 0.45                | 0.54       |
| (3,52)  | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD23 | 12                  | 0.64     | 0.45                | 0.54       |
| (3,74)  | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 12                  | 0.47     | 0.2                 | 0.48       |
| (3,119) | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 12                  | 0.39     | 0.17                | 0.4        |
| (3,371) | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 12                  | 0.3      | 0.24                | 0.15       |
| (3,371) | 1:694:A:THR:H    | 1:668:A:LEU:HB3  | 12                  | 0.3      | 0.24                | 0.15       |
| (1,823) | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 12                  | 0.29     | 0.07                | 0.26       |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:699:A:ALA:HA   | 12                  | 0.11     | 0.01                | 0.11       |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:699:A:ALA:HA   | 12                  | 0.11     | 0.01                | 0.11       |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:699:A:ALA:HA   | 12                  | 0.11     | 0.01                | 0.11       |
| (3,166) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 11                  | 1.45     | 0.82                | 1.25       |
| (1,970) | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 11                  | 0.68     | 0.56                | 0.3        |
| (2,6)   | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 11                  | 0.58     | 0.44                | 0.52       |
| (1,581) | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 11                  | 0.44     | 0.2                 | 0.4        |
| (3,209) | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 11                  | 0.44     | 0.27                | 0.34       |
| (3,209) | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD13 | 11                  | 0.44     | 0.27                | 0.34       |
| (3,209) | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD12 | 11                  | 0.44     | 0.27                | 0.34       |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD22 | 11                  | 0.44     | 0.27                | 0.34       |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 11                  | 0.35     | 0.18                | 0.34       |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 11                  | 0.35     | 0.18                | 0.34       |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 11                  | 0.35     | 0.18                | 0.34       |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 11                  | 0.35     | 0.24                | 0.26       |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 11                  | 0.28     | 0.08                | 0.27       |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB2  | 10                  | 1.56     | 0.97                | 1.58       |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB1  | 10                  | 1.56     | 0.97                | 1.58       |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB3  | 10                  | 1.56     | 0.97                | 1.58       |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 10                  | 1.52     | 1.1                 | 1.42       |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE1  | 10                  | 1.07     | 0.94                | 0.84       |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE3  | 10                  | 1.07     | 0.94                | 0.84       |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE2  | 10                  | 1.07     | 0.94                | 0.84       |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD23 | 1:664:A:ARG:HD2  | 10                  | 0.95     | 0.7                 | 0.78       |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD22 | 1:664:A:ARG:HD2  | 10                  | 0.95     | 0.7                 | 0.78       |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD21 | 1:664:A:ARG:HD2  | 10                  | 0.95     | 0.7                 | 0.78       |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 10                  | 0.92     | 0.36                | 0.96       |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE2  | 10                  | 0.7      | 0.23                | 0.67       |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE3  | 10                  | 0.7      | 0.23                | 0.67       |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:704:A:MET:HE3  | 10                  | 0.7      | 0.23                | 0.67       |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:704:A:MET:HE2  | 10                  | 0.7      | 0.23                | 0.67       |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:704:A:MET:HE1  | 10                  | 0.7      | 0.23                | 0.67       |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE1  | 10                  | 0.7      | 0.23                | 0.67       |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 10                  | 0.67     | 0.46                | 0.7        |
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 10                  | 0.42     | 0.21                | 0.36       |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 10                  | 0.26     | 0.13                | 0.25       |
| (3,283)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:668:A:LEU:HG   | 10                  | 0.26     | 0.13                | 0.25       |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:646:A:GLU:HB2  | 9                   | 2.2      | 1.43                | 2.19       |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:714:A:GLN:HB3  | 9                   | 2.2      | 1.43                | 2.19       |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:701:A:MET:HE1  | 9                   | 2.2      | 1.43                | 2.19       |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:701:A:MET:HE2  | 9                   | 2.2      | 1.43                | 2.19       |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 9                   | 1.56     | 0.81                | 1.36       |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB3  | 9                   | 1.4      | 1.7                 | 1.17       |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB2  | 9                   | 1.4      | 1.7                 | 1.17       |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB1  | 9                   | 1.4      | 1.7                 | 1.17       |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:639:A:HIS:HA   | 9                   | 1.13     | 0.17                | 1.24       |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:639:A:HIS:HA   | 9                   | 1.13     | 0.17                | 1.24       |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:634:A:TRP:HA   | 9                   | 1.13     | 0.17                | 1.24       |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HA   | 9                   | 1.13     | 0.17                | 1.24       |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD23 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD12 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD22 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD22 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD21 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD23 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD23 | 9                   | 1.04     | 0.75                | 1.18       |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 9                   | 0.94     | 0.34                | 1.05       |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 9                   | 0.93     | 0.21                | 0.93       |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 9                   | 0.86     | 0.39                | 0.95       |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB2  | 9                   | 0.86     | 0.39                | 0.95       |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:707:A:ARG:HG3  | 9                   | 0.85     | 0.78                | 0.51       |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:707:A:ARG:HG3  | 9                   | 0.85     | 0.78                | 0.51       |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:707:A:ARG:HG3  | 9                   | 0.85     | 0.78                | 0.51       |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:636:A:GLU:HB2  | 9                   | 0.65     | 0.36                | 0.61       |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:636:A:GLU:HB2  | 9                   | 0.65     | 0.36                | 0.61       |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:636:A:GLU:HB2  | 9                   | 0.65     | 0.36                | 0.61       |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:725:A:GLU:HA   | 9                   | 0.43     | 0.16                | 0.42       |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 9                   | 0.43     | 0.16                | 0.42       |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 9                   | 0.38     | 0.03                | 0.39       |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 9                   | 0.33     | 0.2                 | 0.29       |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD21 | 9                   | 0.28     | 0.1                 | 0.29       |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD22 | 9                   | 0.28     | 0.1                 | 0.29       |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD23 | 9                   | 0.28     | 0.1                 | 0.29       |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 9                   | 0.23     | 0.1                 | 0.21       |
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:711:A:GLN:HB2  | 8                   | 1.43     | 1.23                | 0.86       |
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:711:A:GLN:HB2  | 8                   | 1.43     | 1.23                | 0.86       |
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:711:A:GLN:HB2  | 8                   | 1.43     | 1.23                | 0.86       |
| (1,990)  | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 8                   | 1.4      | 1.09                | 0.8        |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:685:A:ASP:HB3  | 8                   | 0.86     | 0.32                | 0.98       |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:685:A:ASP:HB3  | 8                   | 0.86     | 0.32                | 0.98       |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:717:A:GLU:HG2  | 8                   | 0.86     | 0.32                | 0.98       |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB1  | 1:717:A:GLU:HG2  | 8                   | 0.86     | 0.32                | 0.98       |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB1  | 1:685:A:ASP:HB3  | 8                   | 0.86     | 0.32                | 0.98       |
| (1,186)  | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 8                   | 0.82     | 0.6                 | 0.66       |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:666:A:MET:HG2  | 8                   | 0.77     | 1.02                | 0.42       |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:666:A:MET:HG2  | 8                   | 0.77     | 1.02                | 0.42       |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:666:A:MET:HG2  | 8                   | 0.77     | 1.02                | 0.42       |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:713:A:TYR:HE2  | 8                   | 0.56     | 0.45                | 0.39       |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 8                   | 0.56     | 0.45                | 0.39       |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:713:A:TYR:HE2  | 8                   | 0.56     | 0.45                | 0.39       |
| (1,898)  | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 8                   | 0.56     | 0.23                | 0.72       |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 8                   | 0.35     | 0.34                | 0.19       |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 8                   | 0.35     | 0.34                | 0.19       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB3  | 8                   | 0.35     | 0.34                | 0.19       |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 8                   | 0.34     | 0.3                 | 0.2        |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 8                   | 0.34     | 0.3                 | 0.2        |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 8                   | 0.34     | 0.3                 | 0.2        |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 8                   | 0.28     | 0.11                | 0.34       |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 8                   | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,301)  | 1:643:A:THR:HG22 | 1:646:A:GLU:HG2  | 7                   | 3.09     | 2.11                | 2.39       |
| (1,301)  | 1:643:A:THR:HG23 | 1:646:A:GLU:HG2  | 7                   | 3.09     | 2.11                | 2.39       |
| (1,301)  | 1:643:A:THR:HG21 | 1:646:A:GLU:HG2  | 7                   | 3.09     | 2.11                | 2.39       |
| (1,522)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD13 | 7                   | 1.94     | 1.0                 | 2.03       |
| (1,522)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 7                   | 1.94     | 1.0                 | 2.03       |
| (1,522)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD11 | 7                   | 1.94     | 1.0                 | 2.03       |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB1  | 7                   | 1.83     | 1.81                | 0.86       |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 7                   | 1.83     | 1.81                | 0.86       |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB2  | 7                   | 1.83     | 1.81                | 0.86       |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD23 | 7                   | 0.93     | 0.64                | 1.0        |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD22 | 7                   | 0.93     | 0.64                | 1.0        |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD21 | 7                   | 0.93     | 0.64                | 1.0        |
| (1,300)  | 1:677:A:THR:HG21 | 1:673:A:GLU:HG3  | 7                   | 0.93     | 0.74                | 0.61       |
| (1,300)  | 1:677:A:THR:HG22 | 1:673:A:GLU:HG3  | 7                   | 0.93     | 0.74                | 0.61       |
| (1,300)  | 1:677:A:THR:HG23 | 1:673:A:GLU:HG3  | 7                   | 0.93     | 0.74                | 0.61       |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE3  | 7                   | 0.88     | 0.5                 | 0.61       |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE1  | 7                   | 0.88     | 0.5                 | 0.61       |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE2  | 7                   | 0.88     | 0.5                 | 0.61       |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG22 | 7                   | 0.69     | 0.08                | 0.65       |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG23 | 7                   | 0.69     | 0.08                | 0.65       |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG21 | 7                   | 0.69     | 0.08                | 0.65       |
| (1,620)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 7                   | 0.56     | 0.12                | 0.52       |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 7                   | 0.51     | 0.03                | 0.51       |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 7                   | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG22 | 7                   | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 7                   | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG21 | 7                   | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:689:A:SER:HB3  | 7                   | 0.43     | 0.12                | 0.45       |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB1  | 1:689:A:SER:HB3  | 7                   | 0.43     | 0.12                | 0.45       |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:689:A:SER:HB3  | 7                   | 0.43     | 0.12                | 0.45       |
| (3,27)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG2  | 7                   | 0.42     | 0.29                | 0.31       |
| (3,27)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HG2  | 7                   | 0.42     | 0.29                | 0.31       |
| (3,27)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG3  | 7                   | 0.42     | 0.29                | 0.31       |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 7                   | 0.37     | 0.08                | 0.37       |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB1  | 1:720:A:TRP:HD1  | 7                   | 0.19     | 0.08                | 0.19       |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:720:A:TRP:HD1  | 7                   | 0.19     | 0.08                | 0.19       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:720:A:TRP:HD1  | 7                   | 0.19     | 0.08                | 0.19       |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HA   | 7                   | 0.16     | 0.03                | 0.15       |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:647:A:MET:HG3  | 6                   | 2.23     | 1.86                | 1.35       |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:717:A:GLU:HG2  | 6                   | 2.23     | 1.86                | 1.35       |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:714:A:GLN:HG2  | 6                   | 2.23     | 1.86                | 1.35       |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG23 | 6                   | 1.84     | 0.97                | 1.6        |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG21 | 6                   | 1.84     | 0.97                | 1.6        |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG22 | 6                   | 1.84     | 0.97                | 1.6        |
| (1,604)  | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD12 | 6                   | 1.79     | 1.12                | 1.53       |
| (1,604)  | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD13 | 6                   | 1.79     | 1.12                | 1.53       |
| (1,604)  | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD11 | 6                   | 1.79     | 1.12                | 1.53       |
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:636:A:GLU:HB2  | 6                   | 1.24     | 0.43                | 1.44       |
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:636:A:GLU:HB2  | 6                   | 1.24     | 0.43                | 1.44       |
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:636:A:GLU:HB2  | 6                   | 1.24     | 0.43                | 1.44       |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:632:A:GLN:HB2  | 6                   | 1.18     | 0.57                | 1.21       |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:632:A:GLN:HB2  | 6                   | 1.18     | 0.57                | 1.21       |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:632:A:GLN:HB2  | 6                   | 1.18     | 0.57                | 1.21       |
| (3,161)  | 1:632:A:GLN:HG2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 6                   | 1.17     | 0.72                | 1.3        |
| (3,161)  | 1:632:A:GLN:HG3  | 1:635:A:LEU:HD13 | 6                   | 1.17     | 0.72                | 1.3        |
| (3,161)  | 1:632:A:GLN:HG2  | 1:635:A:LEU:HD11 | 6                   | 1.17     | 0.72                | 1.3        |
| (3,161)  | 1:632:A:GLN:HG3  | 1:635:A:LEU:HD11 | 6                   | 1.17     | 0.72                | 1.3        |
| (3,75)   | 1:628:A:PRO:HG2  | 1:657:A:ASP:HB2  | 6                   | 1.15     | 1.25                | 0.8        |
| (1,1)    | 1:659:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 6                   | 1.12     | 0.89                | 1.04       |
| (1,1)    | 1:659:A:MET:HE3  | 1:663:A:PRO:HA   | 6                   | 1.12     | 0.89                | 1.04       |
| (3,177)  | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:674:A:MET:HA   | 6                   | 1.03     | 0.58                | 0.84       |
| (3,177)  | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:678:A:GLY:HA2  | 6                   | 1.03     | 0.58                | 0.84       |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD23 | 6                   | 0.97     | 0.58                | 0.9        |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD21 | 6                   | 0.97     | 0.58                | 0.9        |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD22 | 6                   | 0.97     | 0.58                | 0.9        |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 6                   | 0.97     | 0.58                | 0.9        |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:636:A:GLU:HG2  | 6                   | 0.91     | 0.19                | 0.99       |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:636:A:GLU:HG2  | 6                   | 0.91     | 0.19                | 0.99       |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:636:A:GLU:HG2  | 6                   | 0.91     | 0.19                | 0.99       |
| (1,261)  | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 6                   | 0.9      | 0.03                | 0.88       |
| (1,261)  | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 6                   | 0.9      | 0.03                | 0.88       |
| (1,1231) | 1:656:A:TYR:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 6                   | 0.87     | 0.46                | 1.07       |
| (3,188)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 6                   | 0.79     | 0.51                | 0.89       |
| (3,188)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:703:A:ALA:HB3  | 6                   | 0.79     | 0.51                | 0.89       |
| (1,803)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HB3  | 6                   | 0.74     | 0.32                | 0.76       |
| (1,837)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:645:A:LEU:H    | 6                   | 0.69     | 0.46                | 0.7        |
| (1,770)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:654:A:GLY:HA3  | 6                   | 0.68     | 0.05                | 0.7        |
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:667:A:MET:HG2  | 6                   | 0.67     | 0.01                | 0.68       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:667:A:MET:HG2  | 6                   | 0.67     | 0.01                | 0.68       |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HG2  | 6                   | 0.64     | 0.2                 | 0.59       |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HG2  | 6                   | 0.64     | 0.2                 | 0.59       |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HB2  | 6                   | 0.61     | 0.56                | 0.46       |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD11 | 1:634:A:TRP:HB2  | 6                   | 0.61     | 0.56                | 0.46       |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HB2  | 6                   | 0.61     | 0.56                | 0.46       |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB1  | 6                   | 0.59     | 0.02                | 0.58       |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 6                   | 0.59     | 0.02                | 0.58       |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB2  | 6                   | 0.59     | 0.02                | 0.58       |
| (1,772)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:655:A:GLU:HB2  | 6                   | 0.55     | 0.2                 | 0.54       |
| (1,305)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HD2  | 6                   | 0.51     | 0.25                | 0.5        |
| (1,305)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HD2  | 6                   | 0.51     | 0.25                | 0.5        |
| (1,605)  | 1:725:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HA   | 6                   | 0.37     | 0.16                | 0.4        |
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:669:A:ALA:HB1  | 6                   | 0.26     | 0.12                | 0.26       |
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:669:A:ALA:HB2  | 6                   | 0.26     | 0.12                | 0.26       |
| (1,904)  | 1:709:A:ALA:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 6                   | 0.17     | 0.03                | 0.17       |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HG2  | 6                   | 0.13     | 0.01                | 0.12       |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HG3  | 6                   | 0.13     | 0.01                | 0.12       |
| (1,47)   | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD13 | 5                   | 1.37     | 0.98                | 1.57       |
| (1,47)   | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD11 | 5                   | 1.37     | 0.98                | 1.57       |
| (1,47)   | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD12 | 5                   | 1.37     | 0.98                | 1.57       |
| (1,250)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:672:A:ALA:HA   | 5                   | 1.35     | 0.58                | 1.31       |
| (1,250)  | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:672:A:ALA:HA   | 5                   | 1.35     | 0.58                | 1.31       |
| (1,523)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HZ3  | 5                   | 1.18     | 0.56                | 1.01       |
| (1,523)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HZ3  | 5                   | 1.18     | 0.56                | 1.01       |
| (1,508)  | 1:625:A:HIS:HB3  | 1:656:A:TYR:HD2  | 5                   | 0.92     | 0.55                | 0.75       |
| (1,527)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:633:A:ASP:HB2  | 5                   | 0.89     | 0.87                | 0.3        |
| (1,527)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:633:A:ASP:HB2  | 5                   | 0.89     | 0.87                | 0.3        |
| (1,527)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:633:A:ASP:HB2  | 5                   | 0.89     | 0.87                | 0.3        |
| (1,1203) | 1:642:A:ASN:H    | 1:640:A:TRP:HA   | 5                   | 0.75     | 0.41                | 0.91       |
| (1,667)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 5                   | 0.55     | 0.18                | 0.47       |
| (1,698)  | 1:637:A:ALA:H    | 1:636:A:GLU:HB2  | 5                   | 0.4      | 0.11                | 0.42       |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HB2  | 5                   | 0.38     | 0.16                | 0.39       |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD23 | 1:634:A:TRP:HB2  | 5                   | 0.38     | 0.16                | 0.39       |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD22 | 1:634:A:TRP:HB2  | 5                   | 0.38     | 0.16                | 0.39       |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:635:A:LEU:HB2  | 5                   | 0.38     | 0.04                | 0.35       |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:635:A:LEU:HB2  | 5                   | 0.38     | 0.04                | 0.35       |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:635:A:LEU:HB2  | 5                   | 0.38     | 0.04                | 0.35       |
| (1,892)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:H    | 5                   | 0.37     | 0.27                | 0.26       |
| (3,57)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG3  | 5                   | 0.36     | 0.23                | 0.23       |
| (3,57)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG2  | 5                   | 0.36     | 0.23                | 0.23       |
| (3,68)   | 1:676:A:PHE:HZ   | 1:718:A:GLU:HB2  | 5                   | 0.33     | 0.22                | 0.28       |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,729)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HB3  | 5                   | 0.33     | 0.17                | 0.28       |
| (1,800)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HB2  | 5                   | 0.17     | 0.07                | 0.14       |
| (3,338)  | 1:654:A:GLY:H    | 1:654:A:GLY:HA2  | 5                   | 0.16     | 0.03                | 0.18       |
| (3,338)  | 1:654:A:GLY:H    | 1:653:A:GLY:HA2  | 5                   | 0.16     | 0.03                | 0.18       |
| (1,87)   | 1:700:A:ALA:HA   | 1:709:A:ALA:HB1  | 5                   | 0.16     | 0.05                | 0.15       |
| (1,87)   | 1:700:A:ALA:HA   | 1:709:A:ALA:HB3  | 5                   | 0.16     | 0.05                | 0.15       |
| (1,895)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:HA2  | 5                   | 0.13     | 0.01                | 0.14       |
| (1,319)  | 1:644:A:ALA:HB3  | 1:718:A:GLU:HB2  | 4                   | 3.13     | 1.57                | 2.36       |
| (1,319)  | 1:644:A:ALA:HB2  | 1:718:A:GLU:HB2  | 4                   | 3.13     | 1.57                | 2.36       |
| (1,319)  | 1:644:A:ALA:HB1  | 1:718:A:GLU:HB2  | 4                   | 3.13     | 1.57                | 2.36       |
| (1,502)  | 1:659:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 4                   | 1.51     | 1.14                | 1.12       |
| (1,502)  | 1:659:A:MET:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 4                   | 1.51     | 1.14                | 1.12       |
| (1,275)  | 1:708:A:LEU:HA   | 1:708:A:LEU:HD13 | 4                   | 1.3      | 0.58                | 1.59       |
| (1,275)  | 1:708:A:LEU:HA   | 1:708:A:LEU:HD11 | 4                   | 1.3      | 0.58                | 1.59       |
| (1,275)  | 1:708:A:LEU:HA   | 1:708:A:LEU:HD12 | 4                   | 1.3      | 0.58                | 1.59       |
| (1,395)  | 1:669:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD21 | 4                   | 0.95     | 0.16                | 0.94       |
| (1,395)  | 1:669:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD22 | 4                   | 0.95     | 0.16                | 0.94       |
| (2,7)    | 1:651:A:ASP:H    | 1:649:A:ASP:HB3  | 4                   | 0.86     | 0.51                | 0.64       |
| (1,376)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 4                   | 0.86     | 0.27                | 0.87       |
| (1,376)  | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:692:A:LEU:HD21 | 4                   | 0.86     | 0.27                | 0.87       |
| (1,376)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 4                   | 0.86     | 0.27                | 0.87       |
| (3,137)  | 1:722:A:GLN:HG2  | 1:725:A:GLU:HB2  | 4                   | 0.8      | 0.34                | 0.89       |
| (3,99)   | 1:663:A:PRO:HB3  | 1:708:A:LEU:HB3  | 4                   | 0.78     | 0.24                | 0.7        |
| (1,972)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:715:A:LYS:HD2  | 4                   | 0.63     | 0.22                | 0.71       |
| (1,302)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:703:A:ALA:HB1  | 4                   | 0.62     | 0.24                | 0.7        |
| (3,77)   | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HA   | 4                   | 0.51     | 0.17                | 0.52       |
| (3,77)   | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HA   | 4                   | 0.51     | 0.17                | 0.52       |
| (3,77)   | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:634:A:TRP:HA   | 4                   | 0.51     | 0.17                | 0.52       |
| (1,727)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:723:A:MET:H    | 4                   | 0.42     | 0.25                | 0.4        |
| (3,281)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 4                   | 0.38     | 0.19                | 0.38       |
| (3,281)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:661:A:ASP:H    | 4                   | 0.38     | 0.19                | 0.38       |
| (1,746)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:655:A:GLU:HA   | 4                   | 0.34     | 0.09                | 0.32       |
| (1,1190) | 1:719:A:ALA:H    | 1:722:A:GLN:HE22 | 4                   | 0.32     | 0.16                | 0.31       |
| (1,1160) | 1:722:A:GLN:H    | 1:686:A:PRO:HB2  | 4                   | 0.31     | 0.27                | 0.16       |
| (3,289)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HB3  | 4                   | 0.29     | 0.21                | 0.2        |
| (3,289)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HG   | 4                   | 0.29     | 0.21                | 0.2        |
| (1,480)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:627:A:SER:HA   | 4                   | 0.28     | 0.18                | 0.22       |
| (1,428)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:635:A:LEU:HA   | 4                   | 0.27     | 0.06                | 0.28       |
| (1,428)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:635:A:LEU:HA   | 4                   | 0.27     | 0.06                | 0.28       |
| (1,215)  | 1:670:A:ARG:HD2  | 1:670:A:ARG:HB2  | 4                   | 0.25     | 0.01                | 0.25       |
| (1,1045) | 1:665:A:TYR:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 4                   | 0.24     | 0.13                | 0.22       |
| (1,616)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HA   | 4                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,992)  | 1:687:A:GLN:HE22 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 3                   | 1.76     | 0.27                | 1.63       |
| (1,279)  | 1:645:A:LEU:HA   | 1:645:A:LEU:HD22 | 3                   | 1.5      | 0.13                | 1.58       |
| (1,279)  | 1:645:A:LEU:HA   | 1:645:A:LEU:HD21 | 3                   | 1.5      | 0.13                | 1.58       |
| (1,351)  | 1:659:A:MET:HE3  | 1:662:A:GLU:HA   | 3                   | 1.5      | 1.26                | 0.82       |
| (1,351)  | 1:659:A:MET:HE2  | 1:662:A:GLU:HA   | 3                   | 1.5      | 1.26                | 0.82       |
| (1,355)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:671:A:GLU:HA   | 3                   | 1.49     | 0.57                | 1.86       |
| (1,355)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:671:A:GLU:HA   | 3                   | 1.49     | 0.57                | 1.86       |
| (1,323)  | 1:713:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB2  | 3                   | 1.37     | 0.14                | 1.46       |
| (1,323)  | 1:713:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB3  | 3                   | 1.37     | 0.14                | 1.46       |
| (1,260)  | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:674:A:MET:HE1  | 3                   | 1.33     | 1.58                | 0.27       |
| (1,260)  | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:674:A:MET:HE3  | 3                   | 1.33     | 1.58                | 0.27       |
| (1,260)  | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:674:A:MET:HE1  | 3                   | 1.33     | 1.58                | 0.27       |
| (1,496)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:713:A:TYR:HE2  | 3                   | 1.3      | 0.2                 | 1.4        |
| (1,496)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 3                   | 1.3      | 0.2                 | 1.4        |
| (1,292)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:694:A:THR:HG21 | 3                   | 1.27     | 0.16                | 1.16       |
| (1,292)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:694:A:THR:HG23 | 3                   | 1.27     | 0.16                | 1.16       |
| (1,292)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:694:A:THR:HG22 | 3                   | 1.27     | 0.16                | 1.16       |
| (1,138)  | 1:684:A:LYS:HE3  | 1:686:A:PRO:HG3  | 3                   | 1.08     | 0.67                | 1.25       |
| (1,138)  | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:686:A:PRO:HG3  | 3                   | 1.08     | 0.67                | 1.25       |
| (1,534)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:643:A:THR:HG21 | 3                   | 0.92     | 0.49                | 1.26       |
| (1,534)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:643:A:THR:HG22 | 3                   | 0.92     | 0.49                | 1.26       |
| (1,534)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:643:A:THR:HG23 | 3                   | 0.92     | 0.49                | 1.26       |
| (1,282)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:685:A:ASP:HB3  | 3                   | 0.85     | 0.43                | 1.06       |
| (1,282)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:685:A:ASP:HB3  | 3                   | 0.85     | 0.43                | 1.06       |
| (1,1235) | 1:723:A:MET:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 3                   | 0.84     | 0.12                | 0.91       |
| (3,169)  | 1:673:A:GLU:HA   | 1:715:A:LYS:HD3  | 3                   | 0.78     | 0.65                | 0.55       |
| (3,169)  | 1:715:A:LYS:HD3  | 1:719:A:ALA:HA   | 3                   | 0.78     | 0.65                | 0.55       |
| (1,1229) | 1:654:A:GLY:H    | 1:651:A:ASP:HA   | 3                   | 0.74     | 0.36                | 0.5        |
| (3,78)   | 1:638:A:LEU:HD11 | 1:634:A:TRP:HB2  | 3                   | 0.73     | 0.17                | 0.72       |
| (3,78)   | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HB2  | 3                   | 0.73     | 0.17                | 0.72       |
| (3,44)   | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 3                   | 0.67     | 0.54                | 0.37       |
| (3,44)   | 1:664:A:ARG:HD2  | 1:668:A:LEU:HD12 | 3                   | 0.67     | 0.54                | 0.37       |
| (3,44)   | 1:664:A:ARG:HD2  | 1:668:A:LEU:HD13 | 3                   | 0.67     | 0.54                | 0.37       |
| (1,353)  | 1:704:A:MET:HE2  | 1:704:A:MET:HA   | 3                   | 0.59     | 0.19                | 0.63       |
| (1,353)  | 1:704:A:MET:HE1  | 1:704:A:MET:HA   | 3                   | 0.59     | 0.19                | 0.63       |
| (1,430)  | 1:708:A:LEU:HG   | 1:705:A:LYS:HB2  | 3                   | 0.52     | 0.38                | 0.3        |
| (1,296)  | 1:677:A:THR:HA   | 1:677:A:THR:HG23 | 3                   | 0.51     | 0.01                | 0.51       |
| (1,296)  | 1:677:A:THR:HA   | 1:677:A:THR:HG21 | 3                   | 0.51     | 0.01                | 0.51       |
| (1,939)  | 1:723:A:MET:H    | 1:723:A:MET:HG2  | 3                   | 0.46     | 0.37                | 0.24       |
| (1,969)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HB3  | 3                   | 0.4      | 0.02                | 0.39       |
| (1,452)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:647:A:MET:HA   | 3                   | 0.38     | 0.07                | 0.39       |
| (2,5)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:H    | 3                   | 0.31     | 0.24                | 0.16       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,933)  | 1:629:A:ASP:H    | 1:628:A:PRO:HA   | 3                   | 0.3      | 0.07                | 0.3        |
| (3,41)   | 1:707:A:ARG:HD2  | 1:707:A:ARG:HB2  | 3                   | 0.29     | 0.02                | 0.3        |
| (3,41)   | 1:670:A:ARG:HD2  | 1:670:A:ARG:HB2  | 3                   | 0.29     | 0.02                | 0.3        |
| (3,127)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:673:A:GLU:HB3  | 3                   | 0.29     | 0.04                | 0.27       |
| (1,211)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:691:A:ASP:HB2  | 3                   | 0.28     | 0.03                | 0.27       |
| (1,1046) | 1:658:A:GLY:H    | 1:657:A:ASP:HA   | 3                   | 0.23     | 0.05                | 0.26       |
| (1,365)  | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HE2  | 3                   | 0.22     | 0.11                | 0.15       |
| (1,365)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HE2  | 3                   | 0.22     | 0.11                | 0.15       |
| (3,256)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:705:A:LYS:HB2  | 3                   | 0.21     | 0.08                | 0.22       |
| (1,1154) | 1:711:A:GLN:H    | 1:711:A:GLN:HG3  | 3                   | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (3,17)   | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:712:A:TYR:HA   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,249)  | 1:696:A:ALA:HA   | 1:668:A:LEU:HD23 | 2                   | 2.01     | 0.01                | 2.01       |
| (1,249)  | 1:696:A:ALA:HA   | 1:668:A:LEU:HD21 | 2                   | 2.01     | 0.01                | 2.01       |
| (1,245)  | 1:675:A:LEU:HD23 | 1:672:A:ALA:HB3  | 2                   | 1.9      | 0.08                | 1.9        |
| (1,245)  | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:672:A:ALA:HB1  | 2                   | 1.9      | 0.08                | 1.9        |
| (1,278)  | 1:675:A:LEU:HA   | 1:675:A:LEU:HD13 | 2                   | 1.81     | 0.02                | 1.81       |
| (1,278)  | 1:675:A:LEU:HA   | 1:675:A:LEU:HD11 | 2                   | 1.81     | 0.02                | 1.81       |
| (1,248)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:668:A:LEU:HD22 | 2                   | 1.67     | 0.15                | 1.67       |
| (1,248)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:668:A:LEU:HD23 | 2                   | 1.67     | 0.15                | 1.67       |
| (1,253)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 2                   | 1.64     | 1.42                | 1.64       |
| (1,1230) | 1:654:A:GLY:H    | 1:651:A:ASP:HB3  | 2                   | 1.56     | 0.63                | 1.56       |
| (1,14)   | 1:628:A:PRO:HA   | 1:631:A:CYS:HB2  | 2                   | 1.44     | 0.84                | 1.44       |
| (3,374)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 2                   | 1.27     | 0.09                | 1.27       |
| (3,374)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 2                   | 1.27     | 0.09                | 1.27       |
| (1,498)  | 1:659:A:MET:HG2  | 1:659:A:MET:HE1  | 2                   | 1.18     | 0.01                | 1.18       |
| (1,498)  | 1:659:A:MET:HG2  | 1:659:A:MET:HE2  | 2                   | 1.18     | 0.01                | 1.18       |
| (1,64)   | 1:668:A:LEU:HA   | 1:668:A:LEU:HD13 | 2                   | 1.11     | 0.02                | 1.11       |
| (1,241)  | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:671:A:GLU:HA   | 2                   | 1.08     | 0.09                | 1.08       |
| (1,241)  | 1:675:A:LEU:HD22 | 1:671:A:GLU:HA   | 2                   | 1.08     | 0.09                | 1.08       |
| (1,281)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:685:A:ASP:HB2  | 2                   | 1.07     | 0.21                | 1.07       |
| (1,281)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:685:A:ASP:HB2  | 2                   | 1.07     | 0.21                | 1.07       |
| (2,3)    | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:724:A:GLU:HG2  | 2                   | 1.05     | 0.31                | 1.05       |
| (1,272)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 2                   | 1.01     | 0.77                | 1.01       |
| (1,272)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 2                   | 1.01     | 0.77                | 1.01       |
| (1,367)  | 1:720:A:TRP:HA   | 1:723:A:MET:HE2  | 2                   | 1.01     | 0.6                 | 1.01       |
| (1,367)  | 1:720:A:TRP:HA   | 1:723:A:MET:HE3  | 2                   | 1.01     | 0.6                 | 1.01       |
| (3,46)   | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:686:A:PRO:HG2  | 2                   | 1.0      | 0.26                | 1.0        |
| (1,488)  | 1:665:A:TYR:HB3  | 1:668:A:LEU:HD21 | 2                   | 0.95     | 0.14                | 0.95       |
| (1,488)  | 1:665:A:TYR:HB3  | 1:668:A:LEU:HD22 | 2                   | 0.95     | 0.14                | 0.95       |
| (1,576)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 2                   | 0.94     | 0.32                | 0.94       |
| (1,283)  | 1:682:A:LEU:HD22 | 1:674:A:MET:HB2  | 2                   | 0.9      | 0.57                | 0.9        |
| (1,283)  | 1:682:A:LEU:HD21 | 1:674:A:MET:HB2  | 2                   | 0.9      | 0.57                | 0.9        |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

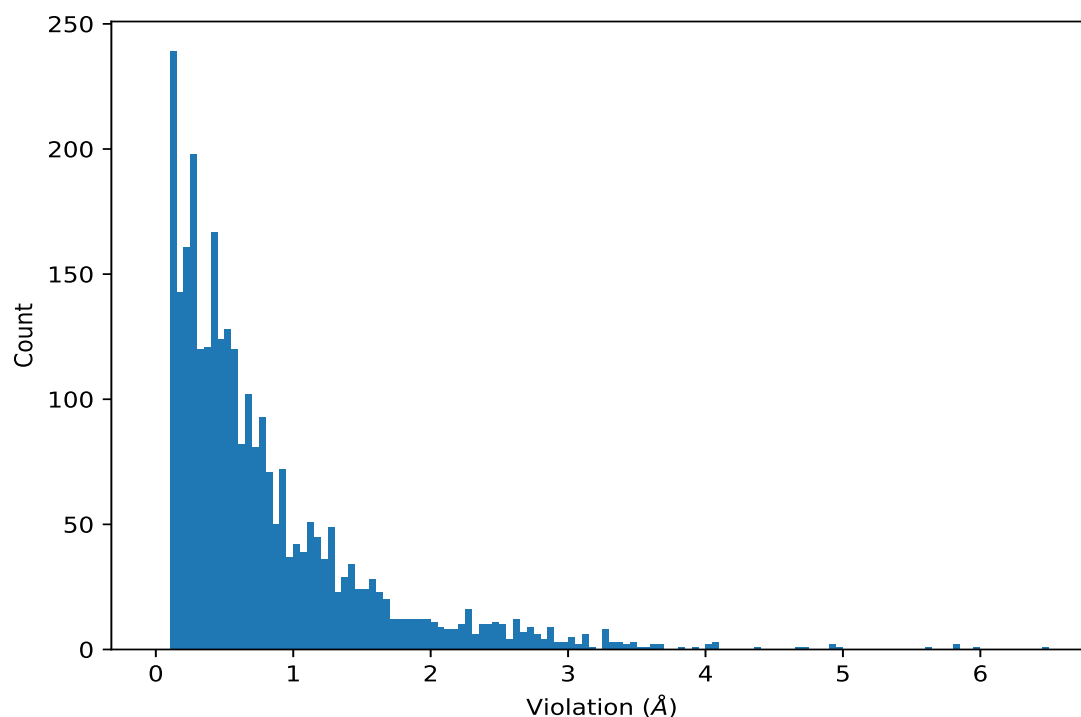
| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,346)  | 1:696:A:ALA:HB1  | 1:668:A:LEU:HD23 | 2                   | 0.84     | 0.0                 | 0.84       |
| (1,346)  | 1:696:A:ALA:HB3  | 1:668:A:LEU:HD21 | 2                   | 0.84     | 0.0                 | 0.84       |
| (1,468)  | 1:663:A:PRO:HD3  | 1:659:A:MET:HA   | 2                   | 0.84     | 0.32                | 0.84       |
| (1,242)  | 1:675:A:LEU:HD23 | 1:672:A:ALA:HA   | 2                   | 0.76     | 0.08                | 0.76       |
| (1,242)  | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:672:A:ALA:HA   | 2                   | 0.76     | 0.08                | 0.76       |
| (3,130)  | 1:634:A:TRP:HB2  | 1:636:A:GLU:HB2  | 2                   | 0.72     | 0.03                | 0.72       |
| (3,173)  | 1:650:A:CYS:HB2  | 1:648:A:THR:HG22 | 2                   | 0.68     | 0.46                | 0.68       |
| (1,997)  | 1:643:A:THR:H    | 1:643:A:THR:HG22 | 2                   | 0.68     | 0.1                 | 0.68       |
| (1,997)  | 1:643:A:THR:H    | 1:643:A:THR:HG23 | 2                   | 0.68     | 0.1                 | 0.68       |
| (1,147)  | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:677:A:THR:HA   | 2                   | 0.67     | 0.37                | 0.67       |
| (1,243)  | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:671:A:GLU:HG3  | 2                   | 0.66     | 0.05                | 0.66       |
| (1,243)  | 1:675:A:LEU:HD22 | 1:671:A:GLU:HG3  | 2                   | 0.66     | 0.05                | 0.66       |
| (1,116)  | 1:678:A:GLY:HA2  | 1:684:A:LYS:HD2  | 2                   | 0.6      | 0.07                | 0.6        |
| (1,754)  | 1:685:A:ASP:H    | 1:675:A:LEU:HD13 | 2                   | 0.54     | 0.15                | 0.54       |
| (1,754)  | 1:685:A:ASP:H    | 1:675:A:LEU:HD11 | 2                   | 0.54     | 0.15                | 0.54       |
| (1,852)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:635:A:LEU:HB2  | 2                   | 0.46     | 0.09                | 0.46       |
| (1,615)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:645:A:LEU:H    | 2                   | 0.45     | 0.35                | 0.45       |
| (1,798)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HA   | 2                   | 0.41     | 0.27                | 0.41       |
| (3,326)  | 1:643:A:THR:H    | 1:642:A:ASN:H    | 2                   | 0.36     | 0.09                | 0.36       |
| (1,81)   | 1:659:A:MET:HA   | 1:659:A:MET:HG3  | 2                   | 0.34     | 0.0                 | 0.34       |
| (1,1012) | 1:704:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HG2  | 2                   | 0.34     | 0.04                | 0.34       |
| (1,88)   | 1:672:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD21 | 2                   | 0.32     | 0.03                | 0.32       |
| (1,88)   | 1:672:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD22 | 2                   | 0.32     | 0.03                | 0.32       |
| (1,829)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:668:A:LEU:HD11 | 2                   | 0.3      | 0.04                | 0.3        |
| (1,314)  | 1:634:A:TRP:HE3  | 1:637:A:ALA:HB1  | 2                   | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (3,88)   | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:704:A:MET:HB2  | 2                   | 0.22     | 0.12                | 0.22       |
| (1,1005) | 1:689:A:SER:H    | 1:684:A:LYS:HA   | 2                   | 0.2      | 0.08                | 0.2        |
| (1,781)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HG2  | 2                   | 0.16     | 0.02                | 0.16       |
| (1,1027) | 1:678:A:GLY:H    | 1:679:A:GLY:HA2  | 2                   | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,834)  | 1:711:A:GLN:H    | 1:710:A:ASN:HB2  | 2                   | 0.13     | 0.02                | 0.13       |
| (1,734)  | 1:634:A:TRP:H    | 1:633:A:ASP:HB2  | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (1,1168) | 1:655:A:GLU:H    | 1:656:A:TYR:H    | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (1,255)  | 1:645:A:LEU:HD11 | 1:645:A:LEU:HA   | 2                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,255)  | 1:645:A:LEU:HD12 | 1:645:A:LEU:HA   | 2                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,252)  | 1:668:A:LEU:HD21 | 1:668:A:LEU:HG   | 2                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,252)  | 1:668:A:LEU:HD23 | 1:668:A:LEU:HG   | 2                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |

<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>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) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,301)  | 1:643:A:THR:HG21 | 1:646:A:GLU:HG2 | 14       | 6.46          |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB1 | 15       | 5.95          |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB1 | 15       | 5.84          |
| (1,319)  | 1:644:A:ALA:HB1  | 1:718:A:GLU:HB2 | 15       | 5.84          |
| (1,301)  | 1:643:A:THR:HG23 | 1:646:A:GLU:HG2 | 17       | 5.64          |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:701:A:MET:HE2 | 6        | 4.97          |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:717:A:GLU:HG2 | 4        | 4.91          |
| (1,320)  | 1:721:A:ALA:HB1  | 1:644:A:ALA:HB1 | 15       | 4.9           |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2 | 11       | 4.74          |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:717:A:GLU:HG2 | 13       | 4.67          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 14       | 4.36          |
| (1,104) | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 17       | 4.1           |
| (3,306) | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HG3  | 4        | 4.09          |
| (1,524) | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:706:A:GLY:HA3  | 19       | 4.05          |
| (2,1)   | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 20       | 4.04          |
| (1,604) | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD12 | 2        | 4.04          |
| (3,306) | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 10       | 3.94          |
| (3,75)  | 1:628:A:PRO:HG2  | 1:657:A:ASP:HB2  | 11       | 3.84          |
| (1,119) | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 18       | 3.67          |
| (1,301) | 1:643:A:THR:HG21 | 1:646:A:GLU:HG2  | 18       | 3.66          |
| (1,503) | 1:666:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 11       | 3.63          |
| (3,13)  | 1:695:A:GLN:HA   | 1:692:A:LEU:HD11 | 8        | 3.61          |
| (1,260) | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:674:A:MET:HE1  | 1        | 3.57          |
| (3,61)  | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 13       | 3.51          |
| (1,70)  | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE3  | 2        | 3.48          |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 12       | 3.47          |
| (1,421) | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:711:A:GLN:HB2  | 4        | 3.46          |
| (1,276) | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:666:A:MET:HG2  | 6        | 3.44          |
| (3,178) | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:646:A:GLU:HB2  | 13       | 3.43          |
| (3,306) | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 6        | 3.39          |
| (3,166) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 13       | 3.38          |
| (1,502) | 1:659:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 12       | 3.37          |
| (1,990) | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 20       | 3.34          |
| (1,503) | 1:666:A:MET:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 17       | 3.32          |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 14       | 3.32          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:668:A:LEU:HB3  | 6        | 3.3           |
| (1,349) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE3  | 18       | 3.29          |
| (3,178) | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:701:A:MET:HE1  | 8        | 3.28          |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE3  | 10       | 3.28          |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 5        | 3.26          |
| (1,351) | 1:659:A:MET:HE2  | 1:662:A:GLU:HA   | 18       | 3.26          |
| (3,191) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG22 | 6        | 3.25          |
| (1,490) | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 8        | 3.25          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:700:A:ALA:HB2  | 5        | 3.19          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 17       | 3.14          |
| (3,61)  | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 8        | 3.13          |
| (1,522) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 13       | 3.12          |
| (1,522) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD13 | 19       | 3.11          |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:714:A:GLN:HB2  | 5        | 3.1           |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:668:A:LEU:HB3  | 10       | 3.1           |
| (1,289) | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 6        | 3.08          |
| (1,253) | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 2        | 3.07          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:711:A:GLN:HB2  | 20       | 3.05          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 18       | 3.05          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD13 | 11       | 3.02          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 18       | 3.02          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 6        | 3.0           |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HG3  | 8        | 2.97          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 1        | 2.96          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 8        | 2.95          |
| (3,55)   | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 11       | 2.94          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG21 | 10       | 2.92          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 17       | 2.91          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:714:A:GLN:HB2  | 14       | 2.9           |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE1  | 7        | 2.9           |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 14       | 2.89          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:682:A:LEU:HD22 | 14       | 2.88          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG21 | 1        | 2.87          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 16       | 2.86          |
| (1,990)  | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 5        | 2.86          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 20       | 2.85          |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB3  | 20       | 2.85          |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG21 | 8        | 2.84          |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 17       | 2.84          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 13       | 2.81          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 10       | 2.81          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD13 | 16       | 2.8           |
| (3,55)   | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 8        | 2.78          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 20       | 2.78          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 10       | 2.78          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 4        | 2.77          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:668:A:LEU:HD12 | 6        | 2.75          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 6        | 2.74          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 17       | 2.74          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 7        | 2.73          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 5        | 2.73          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD12 | 4        | 2.72          |
| (1,522)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD11 | 17       | 2.72          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 2        | 2.7           |
| (3,85)   | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 2        | 2.7           |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 5        | 2.7           |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:706:A:GLY:HA3  | 17       | 2.69          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:706:A:GLY:HA3  | 2        | 2.68          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 18       | 2.67          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 3        | 2.67          |
| (1,273) | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 6        | 2.67          |
| (1,503) | 1:666:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 20       | 2.66          |
| (1,289) | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 10       | 2.66          |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HG   | 13       | 2.65          |
| (3,13)  | 1:695:A:GLN:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 14       | 2.64          |
| (1,489) | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 4        | 2.64          |
| (1,418) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HZ2  | 9        | 2.64          |
| (1,1)   | 1:659:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 18       | 2.64          |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 13       | 2.63          |
| (1,495) | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB1  | 7        | 2.63          |
| (1,71)  | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 6        | 2.63          |
| (1,47)  | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD11 | 12       | 2.62          |
| (3,166) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 10       | 2.61          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 20       | 2.6           |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE3  | 12       | 2.6           |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:635:A:LEU:HG   | 16       | 2.59          |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:638:A:LEU:HA   | 5        | 2.58          |
| (1,251) | 1:668:A:LEU:HD23 | 1:664:A:ARG:HD2  | 18       | 2.58          |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 10       | 2.56          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:692:A:LEU:HG   | 12       | 2.55          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:692:A:LEU:HG   | 4        | 2.54          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:692:A:LEU:HG   | 7        | 2.54          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:692:A:LEU:HG   | 17       | 2.54          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 3        | 2.53          |
| (1,495) | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB2  | 13       | 2.53          |
| (1,289) | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 15       | 2.53          |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:638:A:LEU:HA   | 12       | 2.52          |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 8        | 2.51          |
| (1,362) | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD12 | 17       | 2.5           |
| (3,306) | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 3        | 2.49          |
| (1,319) | 1:644:A:ALA:HB3  | 1:718:A:GLU:HB2  | 14       | 2.49          |
| (1,104) | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 14       | 2.49          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 14       | 2.48          |
| (1,347) | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 19       | 2.48          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 11       | 2.47          |
| (1,361) | 1:663:A:PRO:HB3  | 1:659:A:MET:HE3  | 18       | 2.47          |
| (1,551) | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 19       | 2.46          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 8        | 2.45          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 2        | 2.45          |
| (1,271) | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 6        | 2.45          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 13       | 2.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD22 | 7        | 2.44          |
| (1,71)  | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 10       | 2.44          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:692:A:LEU:HG   | 18       | 2.43          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:692:A:LEU:HG   | 19       | 2.43          |
| (3,61)  | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 4        | 2.43          |
| (3,28)  | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 14       | 2.43          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 10       | 2.42          |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD12 | 20       | 2.41          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 13       | 2.41          |
| (3,121) | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD22 | 6        | 2.4           |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 16       | 2.4           |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:692:A:LEU:HG   | 9        | 2.39          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 4        | 2.39          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD22 | 16       | 2.39          |
| (1,495) | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB3  | 16       | 2.39          |
| (1,301) | 1:643:A:THR:HG22 | 1:646:A:GLU:HG2  | 4        | 2.39          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 11       | 2.37          |
| (2,1)   | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 12       | 2.36          |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 17       | 2.36          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 3        | 2.34          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD13 | 12       | 2.33          |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:638:A:LEU:HA   | 14       | 2.32          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG21 | 4        | 2.32          |
| (1,250) | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:672:A:ALA:HA   | 7        | 2.32          |
| (1,124) | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 15       | 2.31          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD22 | 20       | 2.3           |
| (1,124) | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 6        | 2.29          |
| (1,53)  | 1:636:A:GLU:HA   | 1:640:A:TRP:HD1  | 7        | 2.29          |
| (3,61)  | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 19       | 2.28          |
| (1,14)  | 1:628:A:PRO:HA   | 1:631:A:CYS:HB2  | 18       | 2.28          |
| (1,527) | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:633:A:ASP:HB2  | 16       | 2.27          |
| (1,277) | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:707:A:ARG:HG3  | 20       | 2.27          |
| (3,85)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:692:A:LEU:HG   | 1        | 2.26          |
| (1,349) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE1  | 6        | 2.26          |
| (1,288) | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:695:A:GLN:HG2  | 7        | 2.26          |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD12 | 3        | 2.25          |
| (3,55)  | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 5        | 2.25          |
| (1,421) | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:711:A:GLN:HB2  | 1        | 2.25          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 13       | 2.25          |
| (1,277) | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:707:A:ARG:HG3  | 4        | 2.25          |
| (1,186) | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 14       | 2.25          |
| (3,178) | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:646:A:GLU:HB2  | 1        | 2.24          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB3  | 11       | 2.24          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG23 | 14       | 2.24          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 9        | 2.24          |
| (3,61)   | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HE2  | 6        | 2.23          |
| (1,319)  | 1:644:A:ALA:HB3  | 1:718:A:GLU:HB2  | 17       | 2.23          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 8        | 2.23          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE3  | 15       | 2.22          |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 9        | 2.21          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:682:A:LEU:HD22 | 1        | 2.21          |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:714:A:GLN:HB3  | 18       | 2.19          |
| (1,1230) | 1:654:A:GLY:H    | 1:651:A:ASP:HB3  | 1        | 2.19          |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD21 | 7        | 2.19          |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:632:A:GLN:HB2  | 10       | 2.19          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 1        | 2.18          |
| (1,300)  | 1:677:A:THR:HG22 | 1:673:A:GLU:HG3  | 15       | 2.18          |
| (1,47)   | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD13 | 14       | 2.17          |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG21 | 4        | 2.15          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 13       | 2.14          |
| (1,992)  | 1:687:A:GLN:HE22 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 20       | 2.14          |
| (1,434)  | 1:682:A:LEU:HG   | 1:671:A:GLU:HA   | 14       | 2.14          |
| (3,55)   | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 19       | 2.13          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 14       | 2.13          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE1  | 12       | 2.13          |
| (1,604)  | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD12 | 9        | 2.11          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 3        | 2.1           |
| (3,13)   | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD12 | 3        | 2.09          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 6        | 2.09          |
| (3,61)   | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 3        | 2.08          |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD21 | 6        | 2.07          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG21 | 2        | 2.07          |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 6        | 2.07          |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:701:A:MET:HE1  | 4        | 2.06          |
| (3,87)   | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HE2  | 8        | 2.06          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 13       | 2.06          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 4        | 2.05          |
| (3,161)  | 1:632:A:GLN:HG3  | 1:635:A:LEU:HD11 | 16       | 2.04          |
| (1,522)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD13 | 6        | 2.03          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG23 | 17       | 2.03          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 10       | 2.02          |
| (1,249)  | 1:696:A:ALA:HA   | 1:668:A:LEU:HD23 | 17       | 2.02          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 3        | 2.01          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 2        | 2.01          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 5        | 2.01          |
| (1,249) | 1:696:A:ALA:HA   | 1:668:A:LEU:HD21 | 6        | 2.01          |
| (2,4)   | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 11       | 2.0           |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:638:A:LEU:HA   | 20       | 1.99          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 9        | 1.99          |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE3  | 1        | 1.99          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 12       | 1.99          |
| (1,524) | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:706:A:GLY:HA3  | 9        | 1.98          |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:672:A:ALA:HB1  | 4        | 1.98          |
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 18       | 1.97          |
| (1,319) | 1:644:A:ALA:HB2  | 1:718:A:GLU:HB2  | 20       | 1.97          |
| (1,300) | 1:677:A:THR:HG23 | 1:673:A:GLU:HG3  | 6        | 1.97          |
| (3,177) | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:678:A:GLY:HA2  | 16       | 1.96          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG21 | 3        | 1.96          |
| (1,246) | 1:692:A:LEU:HD12 | 1:671:A:GLU:HB2  | 7        | 1.96          |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:643:A:THR:HG22 | 7        | 1.95          |
| (3,28)  | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HB2  | 1        | 1.95          |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:638:A:LEU:HA   | 3        | 1.94          |
| (2,4)   | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 19       | 1.94          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 6        | 1.93          |
| (1,508) | 1:625:A:HIS:HB3  | 1:656:A:TYR:HD2  | 10       | 1.93          |
| (1,355) | 1:674:A:MET:HE3  | 1:671:A:GLU:HA   | 8        | 1.93          |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 5        | 1.93          |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:638:A:LEU:HA   | 1        | 1.92          |
| (3,55)  | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 17       | 1.91          |
| (2,4)   | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 8        | 1.91          |
| (1,990) | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 18       | 1.91          |
| (3,87)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HE2  | 13       | 1.9           |
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HB2  | 4        | 1.89          |
| (3,87)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB3  | 19       | 1.88          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD12 | 1        | 1.88          |
| (1,523) | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HZ3  | 17       | 1.88          |
| (1,495) | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB2  | 2        | 1.88          |
| (1,267) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 4        | 1.88          |
| (1,520) | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD23 | 14       | 1.87          |
| (1,503) | 1:666:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 12       | 1.87          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 16       | 1.86          |
| (1,355) | 1:674:A:MET:HE2  | 1:671:A:GLU:HA   | 4        | 1.86          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG23 | 19       | 1.85          |
| (2,1)   | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 7        | 1.84          |
| (1,104) | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 1        | 1.84          |
| (1,278) | 1:675:A:LEU:HA   | 1:675:A:LEU:HD13 | 18       | 1.83          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,131) | 1:638:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HB2  | 18       | 1.82          |
| (3,93)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD21 | 18       | 1.82          |
| (1,248) | 1:665:A:TYR:HA   | 1:668:A:LEU:HD22 | 17       | 1.82          |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:HD23 | 1:672:A:ALA:HB3  | 18       | 1.81          |
| (3,161) | 1:632:A:GLN:HG3  | 1:635:A:LEU:HD13 | 7        | 1.8           |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 15       | 1.8           |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 15       | 1.8           |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG21 | 20       | 1.8           |
| (1,138) | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:686:A:PRO:HG3  | 11       | 1.8           |
| (3,87)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 14       | 1.79          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD11 | 2        | 1.79          |
| (1,523) | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HZ3  | 15       | 1.79          |
| (1,347) | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 9        | 1.79          |
| (1,278) | 1:675:A:LEU:HA   | 1:675:A:LEU:HD11 | 4        | 1.79          |
| (3,121) | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD21 | 10       | 1.78          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 5        | 1.78          |
| (1,272) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 6        | 1.78          |
| (3,87)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HE2  | 9        | 1.77          |
| (1,349) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE1  | 14       | 1.77          |
| (2,4)   | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 15       | 1.75          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 3        | 1.75          |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:648:A:THR:HG21 | 2        | 1.74          |
| (2,7)   | 1:651:A:ASP:H    | 1:649:A:ASP:HB3  | 17       | 1.74          |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE1  | 2        | 1.74          |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 16       | 1.74          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 10       | 1.73          |
| (3,161) | 1:632:A:GLN:HG3  | 1:635:A:LEU:HD13 | 19       | 1.72          |
| (3,87)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HE2  | 3        | 1.72          |
| (1,604) | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD12 | 13       | 1.72          |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 19       | 1.72          |
| (1,275) | 1:708:A:LEU:HA   | 1:708:A:LEU:HD11 | 4        | 1.72          |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE2  | 9        | 1.71          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 19       | 1.71          |
| (1,104) | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 12       | 1.7           |
| (3,87)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1        | 1.69          |
| (3,55)  | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 10       | 1.69          |
| (2,4)   | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 18       | 1.69          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 16       | 1.69          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 2        | 1.68          |
| (1,347) | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 13       | 1.68          |
| (3,169) | 1:673:A:GLU:HA   | 1:715:A:LYS:HD3  | 14       | 1.67          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD12 | 9        | 1.67          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,486)  | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE3  | 19       | 1.67          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 14       | 1.67          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 8        | 1.67          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 11       | 1.67          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 15       | 1.67          |
| (3,124)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:638:A:LEU:HA   | 18       | 1.66          |
| (3,87)   | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HE2  | 5        | 1.66          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD22 | 18       | 1.66          |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE3  | 5        | 1.66          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 8        | 1.66          |
| (1,301)  | 1:643:A:THR:HG23 | 1:646:A:GLU:HG2  | 10       | 1.66          |
| (3,61)   | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 9        | 1.64          |
| (3,55)   | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 1        | 1.64          |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE3  | 1:705:A:LYS:HE2  | 3        | 1.64          |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB2  | 17       | 1.64          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 1        | 1.64          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:715:A:LYS:HD2  | 1        | 1.64          |
| (1,275)  | 1:708:A:LEU:HA   | 1:708:A:LEU:HD13 | 1        | 1.64          |
| (3,55)   | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 9        | 1.63          |
| (3,55)   | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 16       | 1.63          |
| (1,992)  | 1:687:A:GLN:HE22 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 18       | 1.63          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 5        | 1.63          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 10       | 1.63          |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:717:A:GLU:HG2  | 6        | 1.62          |
| (3,177)  | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:678:A:GLY:HA2  | 12       | 1.62          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 17       | 1.62          |
| (1,287)  | 1:692:A:LEU:HA   | 1:692:A:LEU:HD21 | 7        | 1.62          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 1        | 1.61          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 20       | 1.61          |
| (1,279)  | 1:645:A:LEU:HA   | 1:645:A:LEU:HD21 | 20       | 1.61          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:665:A:TYR:HB3  | 5        | 1.6           |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:665:A:TYR:HB3  | 9        | 1.6           |
| (3,55)   | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 15       | 1.6           |
| (1,367)  | 1:720:A:TRP:HA   | 1:723:A:MET:HE2  | 1        | 1.6           |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE1  | 1        | 1.59          |
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 11       | 1.58          |
| (3,124)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:638:A:LEU:HA   | 4        | 1.58          |
| (1,527)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:633:A:ASP:HB2  | 6        | 1.58          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 7        | 1.58          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 18       | 1.58          |
| (1,279)  | 1:645:A:LEU:HA   | 1:645:A:LEU:HD21 | 10       | 1.58          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 14       | 1.57          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HB2  | 11       | 1.57          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 8        | 1.57          |
| (1,333) | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 5        | 1.57          |
| (1,291) | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG23 | 7        | 1.57          |
| (1,207) | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 14       | 1.57          |
| (1,47)  | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD13 | 5        | 1.57          |
| (1,1)   | 1:659:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 3        | 1.57          |
| (3,55)  | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 14       | 1.56          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 18       | 1.56          |
| (1,1)   | 1:659:A:MET:HE3  | 1:663:A:PRO:HA   | 19       | 1.56          |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:665:A:TYR:HB3  | 7        | 1.55          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:638:A:LEU:HD21 | 4        | 1.55          |
| (1,515) | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:636:A:GLU:HB2  | 9        | 1.55          |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 5        | 1.55          |
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HB2  | 16       | 1.55          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 5        | 1.55          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 12       | 1.55          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 13       | 1.55          |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 2        | 1.55          |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 7        | 1.55          |
| (3,55)  | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 18       | 1.54          |
| (1,347) | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE1  | 14       | 1.54          |
| (1,333) | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:715:A:LYS:HD2  | 16       | 1.54          |
| (1,275) | 1:708:A:LEU:HA   | 1:708:A:LEU:HD12 | 20       | 1.54          |
| (3,166) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 20       | 1.53          |
| (3,61)  | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 11       | 1.53          |
| (2,2)   | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 6        | 1.52          |
| (1,992) | 1:687:A:GLN:HE22 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 5        | 1.52          |
| (1,419) | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HB2  | 17       | 1.52          |
| (1,387) | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 11       | 1.52          |
| (1,301) | 1:643:A:THR:HG23 | 1:646:A:GLU:HG2  | 6        | 1.52          |
| (1,267) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 16       | 1.52          |
| (1,248) | 1:665:A:TYR:HA   | 1:668:A:LEU:HD23 | 6        | 1.52          |
| (1,80)  | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 11       | 1.52          |
| (1,503) | 1:666:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 5        | 1.51          |
| (1,502) | 1:659:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 11       | 1.51          |
| (1,490) | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HD2  | 4        | 1.51          |
| (1,333) | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 17       | 1.51          |
| (1,207) | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 6        | 1.51          |
| (1,207) | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 11       | 1.51          |
| (3,188) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 8        | 1.5           |
| (3,91)  | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 1        | 1.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:636:A:GLU:HB2  | 6        | 1.5           |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HB2  | 14       | 1.5           |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD23 | 3        | 1.49          |
| (3,61)   | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HE2  | 10       | 1.49          |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 10       | 1.49          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 19       | 1.49          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 20       | 1.49          |
| (1,292)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:694:A:THR:HG22 | 6        | 1.49          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 13       | 1.48          |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE3  | 1:705:A:LYS:HE2  | 7        | 1.48          |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 15       | 1.48          |
| (1,496)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 6        | 1.48          |
| (1,486)  | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE1  | 7        | 1.48          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HB2  | 5        | 1.48          |
| (1,323)  | 1:713:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB3  | 6        | 1.48          |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE1  | 14       | 1.48          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 20       | 1.47          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:665:A:TYR:HB3  | 11       | 1.47          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 1        | 1.47          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 4        | 1.47          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 8        | 1.47          |
| (1,283)  | 1:682:A:LEU:HD21 | 1:674:A:MET:HB2  | 14       | 1.47          |
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:636:A:GLU:HB2  | 2        | 1.46          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 4        | 1.46          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 17       | 1.46          |
| (1,323)  | 1:713:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB3  | 12       | 1.46          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 12       | 1.45          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 18       | 1.45          |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 14       | 1.45          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 9        | 1.45          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 14       | 1.44          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 6        | 1.44          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:665:A:TYR:HB3  | 2        | 1.44          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 9        | 1.44          |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 1        | 1.44          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE3  | 1:663:A:PRO:HA   | 3        | 1.44          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE2  | 9        | 1.44          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 3        | 1.44          |
| (1,250)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:672:A:ALA:HA   | 10       | 1.44          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 16       | 1.43          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 7        | 1.43          |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 10       | 1.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 16       | 1.43          |
| (1,387)  | 1:664:A:ARG:HA   | 1:663:A:PRO:HG3  | 6        | 1.43          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 12       | 1.43          |
| (3,44)   | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 18       | 1.42          |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 1        | 1.42          |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:632:A:GLN:HB2  | 2        | 1.42          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 11       | 1.42          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 4        | 1.42          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD21 | 1:664:A:ARG:HD2  | 5        | 1.42          |
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 18       | 1.41          |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 1        | 1.41          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:667:A:MET:HB2  | 17       | 1.41          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 10       | 1.41          |
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:636:A:GLU:HB2  | 19       | 1.41          |
| (1,486)  | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE2  | 11       | 1.41          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 9        | 1.41          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:715:A:LYS:HD2  | 14       | 1.41          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 5        | 1.41          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 8        | 1.4           |
| (3,55)   | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 12       | 1.4           |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 14       | 1.4           |
| (1,496)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 12       | 1.4           |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB3  | 3        | 1.4           |
| (3,124)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:638:A:LEU:HA   | 11       | 1.39          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 19       | 1.39          |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 7        | 1.39          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 1        | 1.39          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 15       | 1.39          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 3        | 1.38          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 15       | 1.38          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 6        | 1.38          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:715:A:LYS:HD2  | 9        | 1.38          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 1        | 1.38          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HB2  | 14       | 1.37          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE1  | 4        | 1.37          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 19       | 1.37          |
| (3,374)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 4        | 1.36          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 17       | 1.36          |
| (2,3)    | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:724:A:GLU:HG2  | 14       | 1.36          |
| (1,1231) | 1:656:A:TYR:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 18       | 1.36          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 13       | 1.36          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE3  | 16       | 1.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 13       | 1.36          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 8        | 1.36          |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HA   | 14       | 1.35          |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE2  | 12       | 1.35          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 6        | 1.35          |
| (3,92)   | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HG   | 12       | 1.34          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 4        | 1.34          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 5        | 1.34          |
| (1,604)  | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD11 | 19       | 1.34          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD22 | 1:664:A:ARG:HD2  | 6        | 1.34          |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 7        | 1.33          |
| (1,837)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:645:A:LEU:H    | 17       | 1.33          |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB3  | 4        | 1.33          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 15       | 1.33          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 18       | 1.33          |
| (3,92)   | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HG   | 18       | 1.32          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD12 | 4        | 1.32          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 20       | 1.32          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HB2  | 3        | 1.32          |
| (1,279)  | 1:645:A:LEU:HA   | 1:645:A:LEU:HD22 | 16       | 1.32          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 20       | 1.32          |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 11       | 1.31          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 7        | 1.31          |
| (1,250)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:672:A:ALA:HA   | 6        | 1.31          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 8        | 1.3           |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 15       | 1.3           |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE1  | 2        | 1.3           |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 1        | 1.3           |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HB2  | 7        | 1.29          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 10       | 1.29          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 14       | 1.29          |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE2  | 15       | 1.29          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 8        | 1.29          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HB2  | 20       | 1.29          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 3        | 1.29          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 17       | 1.29          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:665:A:TYR:HB3  | 3        | 1.28          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 4        | 1.28          |
| (1,281)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:685:A:ASP:HB2  | 18       | 1.28          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 6        | 1.28          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD22 | 1:664:A:ARG:HD2  | 3        | 1.28          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 1        | 1.28          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:634:A:TRP:HA   | 5        | 1.27          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 6        | 1.27          |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 2        | 1.27          |
| (3,46)   | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:686:A:PRO:HG2  | 11       | 1.27          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 5        | 1.27          |
| (1,576)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 11       | 1.27          |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB3  | 11       | 1.27          |
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:711:A:GLN:HB2  | 6        | 1.27          |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:632:A:GLN:HB2  | 8        | 1.27          |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:713:A:TYR:HE2  | 3        | 1.27          |
| (1,254)  | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:682:A:LEU:HA   | 14       | 1.27          |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 5        | 1.27          |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:634:A:TRP:HA   | 11       | 1.26          |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HA   | 12       | 1.26          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 11       | 1.26          |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 15       | 1.26          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 11       | 1.26          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 12       | 1.26          |
| (1,534)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:643:A:THR:HG22 | 6        | 1.26          |
| (1,534)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:643:A:THR:HG23 | 14       | 1.26          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:692:A:LEU:HB2  | 3        | 1.26          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:692:A:LEU:HB2  | 11       | 1.26          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 11       | 1.26          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 9        | 1.26          |
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 9        | 1.25          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HG3  | 11       | 1.25          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 3        | 1.25          |
| (1,1229) | 1:654:A:GLY:H    | 1:651:A:ASP:HA   | 11       | 1.25          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 2        | 1.25          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:692:A:LEU:HB2  | 4        | 1.25          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:692:A:LEU:HB2  | 9        | 1.25          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 19       | 1.25          |
| (1,282)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:685:A:ASP:HB3  | 18       | 1.25          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 7        | 1.25          |
| (1,138)  | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:686:A:PRO:HG3  | 12       | 1.25          |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HA   | 20       | 1.24          |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 4        | 1.24          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 15       | 1.24          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:715:A:LYS:HD2  | 7        | 1.24          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:692:A:LEU:HB2  | 1        | 1.24          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 8        | 1.24          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 12       | 1.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:692:A:LEU:HB2  | 13       | 1.24          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 16       | 1.24          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 18       | 1.24          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 18       | 1.24          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 13       | 1.24          |
| (3,92)   | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:635:A:LEU:HG   | 20       | 1.23          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:667:A:MET:HB2  | 13       | 1.23          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:665:A:TYR:HB3  | 15       | 1.23          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 17       | 1.23          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:706:A:GLY:HA3  | 15       | 1.23          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE3  | 20       | 1.23          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 17       | 1.23          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:692:A:LEU:HB2  | 20       | 1.23          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 19       | 1.23          |
| (1,803)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HB3  | 11       | 1.22          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:692:A:LEU:HB2  | 14       | 1.22          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 16       | 1.22          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 18       | 1.22          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 16       | 1.22          |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE2  | 9        | 1.22          |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD12 | 4        | 1.21          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 7        | 1.21          |
| (1,1231) | 1:656:A:TYR:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 15       | 1.21          |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 15       | 1.21          |
| (1,571)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 6        | 1.21          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 13       | 1.21          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 1        | 1.21          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 2        | 1.21          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 20       | 1.21          |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 19       | 1.2           |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 19       | 1.2           |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 1        | 1.2           |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 2        | 1.2           |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 9        | 1.2           |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 2        | 1.2           |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 8        | 1.19          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 14       | 1.19          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 17       | 1.19          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:667:A:MET:HB2  | 9        | 1.19          |
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1        | 1.19          |
| (1,498)  | 1:659:A:MET:HG2  | 1:659:A:MET:HE1  | 16       | 1.19          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HG3  | 3        | 1.19          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,374)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 18       | 1.18          |
| (3,124)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:637:A:ALA:HA   | 19       | 1.18          |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD22 | 8        | 1.18          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 3        | 1.18          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 20       | 1.18          |
| (3,91)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HB2  | 2        | 1.18          |
| (1,1203) | 1:642:A:ASN:H    | 1:640:A:TRP:HA   | 8        | 1.18          |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD21 | 20       | 1.18          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 1        | 1.18          |
| (1,395)  | 1:669:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD22 | 5        | 1.18          |
| (1,376)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 15       | 1.18          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 10       | 1.18          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 14       | 1.18          |
| (1,241)  | 1:675:A:LEU:HD22 | 1:671:A:GLU:HA   | 4        | 1.18          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 17       | 1.18          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 20       | 1.17          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 19       | 1.17          |
| (1,890)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HG2  | 10       | 1.17          |
| (1,522)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD13 | 14       | 1.17          |
| (1,498)  | 1:659:A:MET:HG2  | 1:659:A:MET:HE2  | 12       | 1.17          |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB2  | 10       | 1.17          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:715:A:LYS:HD2  | 13       | 1.17          |
| (1,323)  | 1:713:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB2  | 16       | 1.17          |
| (3,99)   | 1:663:A:PRO:HB3  | 1:708:A:LEU:HB3  | 6        | 1.16          |
| (1,1231) | 1:656:A:TYR:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 4        | 1.16          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 8        | 1.16          |
| (1,468)  | 1:663:A:PRO:HD3  | 1:659:A:MET:HA   | 18       | 1.16          |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:632:A:GLN:HB2  | 15       | 1.16          |
| (1,292)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:694:A:THR:HG23 | 12       | 1.16          |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG22 | 9        | 1.16          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 5        | 1.16          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 8        | 1.16          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 9        | 1.15          |
| (3,173)  | 1:650:A:CYS:HB2  | 1:648:A:THR:HG22 | 10       | 1.15          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 18       | 1.15          |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD22 | 8        | 1.15          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 9        | 1.15          |
| (1,292)  | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:694:A:THR:HG21 | 16       | 1.15          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 1        | 1.15          |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 16       | 1.15          |
| (3,137)  | 1:722:A:GLN:HG2  | 1:725:A:GLU:HB2  | 2        | 1.14          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 4        | 1.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 13       | 1.14          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 2        | 1.14          |
| (3,28)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HB2  | 3        | 1.14          |
| (1,837)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:645:A:LEU:H    | 11       | 1.14          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 3        | 1.14          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HD2  | 17       | 1.14          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HB3  | 16       | 1.14          |
| (1,250)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:672:A:ALA:HA   | 5        | 1.14          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 8        | 1.14          |
| (3,188)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:703:A:ALA:HB3  | 10       | 1.13          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 5        | 1.13          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 9        | 1.13          |
| (1,1234) | 1:659:A:MET:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 12       | 1.13          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 5        | 1.13          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1        | 1.13          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 4        | 1.13          |
| (1,64)   | 1:668:A:LEU:HA   | 1:668:A:LEU:HD13 | 17       | 1.13          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 19       | 1.12          |
| (3,188)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 14       | 1.12          |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:717:A:GLU:HG2  | 5        | 1.12          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:665:A:TYR:HB3  | 17       | 1.12          |
| (3,75)   | 1:628:A:PRO:HG2  | 1:657:A:ASP:HB2  | 12       | 1.12          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 1        | 1.12          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 8        | 1.12          |
| (1,1203) | 1:642:A:ASN:H    | 1:640:A:TRP:HA   | 1        | 1.12          |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD22 | 5        | 1.12          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 10       | 1.12          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 8        | 1.12          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 12       | 1.12          |
| (1,207)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:709:A:ALA:HA   | 2        | 1.12          |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 7        | 1.11          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HD2  | 20       | 1.11          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 12       | 1.11          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:715:A:LYS:HD2  | 20       | 1.11          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 8        | 1.11          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 1        | 1.11          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 13       | 1.1           |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD22 | 8        | 1.1           |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 12       | 1.1           |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 7        | 1.1           |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 20       | 1.1           |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 7        | 1.09          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:706:A:GLY:HA3  | 8        | 1.09          |
| (1,488)  | 1:665:A:TYR:HB3  | 1:668:A:LEU:HD21 | 17       | 1.09          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 3        | 1.09          |
| (1,64)   | 1:668:A:LEU:HA   | 1:668:A:LEU:HD13 | 6        | 1.09          |
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 1        | 1.08          |
| (3,137)  | 1:722:A:GLN:HG2  | 1:725:A:GLU:HB2  | 8        | 1.08          |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB2  | 9        | 1.08          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 17       | 1.08          |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:636:A:GLU:HG2  | 2        | 1.08          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 11       | 1.08          |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:717:A:GLU:HG2  | 18       | 1.07          |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:685:A:ASP:HB3  | 2        | 1.07          |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HA   | 18       | 1.07          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:705:A:LYS:HE2  | 19       | 1.07          |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:636:A:GLU:HB2  | 13       | 1.07          |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:636:A:GLU:HB2  | 16       | 1.07          |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 19       | 1.07          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 19       | 1.06          |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG23 | 17       | 1.06          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HG3  | 19       | 1.06          |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 10       | 1.06          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 12       | 1.06          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 1        | 1.06          |
| (1,430)  | 1:708:A:LEU:HG   | 1:705:A:LYS:HB2  | 6        | 1.06          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HG3  | 8        | 1.06          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 10       | 1.06          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 13       | 1.06          |
| (1,282)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:685:A:ASP:HB3  | 4        | 1.06          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 4        | 1.06          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 10       | 1.06          |
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 15       | 1.05          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 1        | 1.05          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:711:A:GLN:HG3  | 9        | 1.05          |
| (3,55)   | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 7        | 1.05          |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 5        | 1.05          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 14       | 1.05          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 2        | 1.05          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 14       | 1.05          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 2        | 1.04          |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:685:A:ASP:HB3  | 13       | 1.04          |
| (3,104)  | 1:673:A:GLU:HA   | 1:692:A:LEU:HD23 | 7        | 1.04          |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 17       | 1.04          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 2        | 1.04          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 4        | 1.04          |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:636:A:GLU:HG2  | 1        | 1.04          |
| (1,376)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 5        | 1.04          |
| (1,147)  | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:677:A:THR:HA   | 20       | 1.04          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE1  | 20       | 1.03          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 1        | 1.03          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 11       | 1.03          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:708:A:LEU:HD11 | 8        | 1.03          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 19       | 1.03          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 11       | 1.03          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 16       | 1.02          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 10       | 1.02          |
| (3,61)   | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 16       | 1.02          |
| (3,55)   | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 6        | 1.02          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 4        | 1.02          |
| (1,496)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:713:A:TYR:HE2  | 16       | 1.02          |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:636:A:GLU:HG2  | 6        | 1.02          |
| (1,212)  | 1:683:A:GLU:HB3  | 1:684:A:LYS:HG3  | 3        | 1.02          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE2  | 1        | 1.01          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 15       | 1.01          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 16       | 1.01          |
| (1,523)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HZ3  | 10       | 1.01          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:708:A:LEU:HD12 | 11       | 1.01          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 12       | 1.01          |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HG2  | 8        | 1.01          |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE1  | 6        | 1.01          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 1        | 1.0           |
| (3,61)   | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 20       | 1.0           |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD22 | 9        | 1.0           |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 12       | 1.0           |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 14       | 1.0           |
| (1,508)  | 1:625:A:HIS:HB3  | 1:656:A:TYR:HD2  | 7        | 1.0           |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 9        | 1.0           |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:636:A:GLU:HB2  | 6        | 1.0           |
| (1,291)  | 1:676:A:PHE:HD2  | 1:677:A:THR:HG23 | 6        | 1.0           |
| (1,257)  | 1:638:A:LEU:HA   | 1:638:A:LEU:HD11 | 12       | 1.0           |
| (1,186)  | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 4        | 1.0           |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG23 | 1        | 0.99          |
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 19       | 0.99          |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB1  | 1:685:A:ASP:HB3  | 18       | 0.99          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 18       | 0.99          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 20       | 0.99          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 6        | 0.99          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:668:A:LEU:HD13 | 16       | 0.99          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 8        | 0.99          |
| (1,241)  | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:671:A:GLU:HA   | 18       | 0.99          |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:647:A:MET:HG3  | 2        | 0.98          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 5        | 0.98          |
| (1,1231) | 1:656:A:TYR:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 14       | 0.98          |
| (1,939)  | 1:723:A:MET:H    | 1:723:A:MET:HG2  | 2        | 0.98          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:706:A:GLY:HA3  | 6        | 0.98          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 4        | 0.98          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 4        | 0.98          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HD2  | 11       | 0.98          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE2  | 17       | 0.98          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 12       | 0.98          |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:685:A:ASP:HB3  | 4        | 0.97          |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 20       | 0.97          |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 7        | 0.97          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 14       | 0.97          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 11       | 0.97          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 20       | 0.97          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 16       | 0.97          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 9        | 0.97          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 12       | 0.96          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 18       | 0.96          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 3        | 0.96          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 12       | 0.96          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HD2  | 13       | 0.96          |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:636:A:GLU:HB2  | 7        | 0.96          |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:636:A:GLU:HG2  | 10       | 0.96          |
| (1,395)  | 1:669:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD22 | 15       | 0.96          |
| (1,261)  | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 18       | 0.96          |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 18       | 0.96          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 5        | 0.95          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HB2  | 16       | 0.95          |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:685:A:ASP:HB3  | 3        | 0.95          |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 18       | 0.95          |
| (3,123)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:639:A:HIS:HA   | 1        | 0.95          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 11       | 0.95          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 2        | 0.95          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 15       | 0.95          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 9        | 0.95          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE3  | 3        | 0.94          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG22 | 10       | 0.94          |
| (3,177)  | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:678:A:GLY:HA2  | 8        | 0.94          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HB2  | 3        | 0.94          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HD2  | 10       | 0.94          |
| (3,78)   | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HB2  | 15       | 0.94          |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 16       | 0.94          |
| (3,27)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HG2  | 11       | 0.94          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 12       | 0.94          |
| (1,1235) | 1:723:A:MET:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 17       | 0.94          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 20       | 0.94          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 11       | 0.94          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HB2  | 13       | 0.94          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 19       | 0.94          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 12       | 0.94          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 3        | 0.93          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 20       | 0.93          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:705:A:LYS:HE2  | 16       | 0.93          |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 14       | 0.93          |
| (1,1230) | 1:654:A:GLY:H    | 1:651:A:ASP:HB3  | 11       | 0.93          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 10       | 0.93          |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 16       | 0.93          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 19       | 0.93          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG22 | 7        | 0.92          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HB2  | 8        | 0.92          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:665:A:TYR:HB3  | 12       | 0.92          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 1        | 0.92          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 6        | 0.92          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 13       | 0.92          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 14       | 0.92          |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB1  | 3        | 0.92          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HG3  | 3        | 0.92          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HG3  | 9        | 0.92          |
| (1,395)  | 1:669:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD22 | 6        | 0.92          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 3        | 0.91          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 1        | 0.91          |
| (3,92)   | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HG   | 17       | 0.91          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 17       | 0.91          |
| (1,1235) | 1:723:A:MET:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 13       | 0.91          |
| (1,1203) | 1:642:A:ASN:H    | 1:640:A:TRP:HA   | 6        | 0.91          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 5        | 0.91          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 20       | 0.91          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,604) | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD12 | 16       | 0.91          |
| (1,522) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 8        | 0.91          |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 2        | 0.91          |
| (1,362) | 1:667:A:MET:HE3  | 1:668:A:LEU:HD11 | 19       | 0.91          |
| (1,267) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 19       | 0.91          |
| (1,93)  | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 10       | 0.91          |
| (1,71)  | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 14       | 0.91          |
| (3,228) | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 17       | 0.9           |
| (3,170) | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HB2  | 20       | 0.9           |
| (3,147) | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 8        | 0.9           |
| (3,123) | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:639:A:HIS:HA   | 4        | 0.9           |
| (3,67)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD23 | 15       | 0.9           |
| (1,837) | 1:646:A:GLU:H    | 1:645:A:LEU:H    | 3        | 0.9           |
| (1,788) | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 17       | 0.9           |
| (1,788) | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 20       | 0.9           |
| (1,414) | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HG3  | 14       | 0.9           |
| (1,362) | 1:667:A:MET:HE3  | 1:668:A:LEU:HD11 | 10       | 0.9           |
| (1,289) | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 14       | 0.9           |
| (1,267) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 3        | 0.9           |
| (1,261) | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 17       | 0.9           |
| (1,186) | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 8        | 0.9           |
| (3,196) | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 1        | 0.89          |
| (3,196) | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 5        | 0.89          |
| (3,129) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB2  | 2        | 0.89          |
| (3,123) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:639:A:HIS:HA   | 3        | 0.89          |
| (3,67)  | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD23 | 3        | 0.89          |
| (1,984) | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HA   | 14       | 0.89          |
| (1,788) | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 10       | 0.89          |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 10       | 0.89          |
| (1,493) | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 18       | 0.89          |
| (1,333) | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:715:A:LYS:HD2  | 19       | 0.89          |
| (1,261) | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 19       | 0.89          |
| (3,206) | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 10       | 0.88          |
| (3,161) | 1:632:A:GLN:HG2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 6        | 0.88          |
| (3,104) | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 2        | 0.88          |
| (3,89)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 15       | 0.88          |
| (3,55)  | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 20       | 0.88          |
| (2,2)   | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 4        | 0.88          |
| (1,892) | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:H    | 12       | 0.88          |
| (1,803) | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HB3  | 18       | 0.88          |
| (1,788) | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 7        | 0.88          |
| (1,772) | 1:655:A:GLU:H    | 1:655:A:GLU:HB2  | 11       | 0.88          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 12       | 0.88          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 19       | 0.88          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 6        | 0.88          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 13       | 0.88          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HG3  | 11       | 0.88          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HG3  | 16       | 0.88          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HG3  | 17       | 0.88          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 18       | 0.88          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:708:A:LEU:HD12 | 7        | 0.88          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:682:A:LEU:HD22 | 12       | 0.88          |
| (1,261)  | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 1        | 0.88          |
| (1,261)  | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 15       | 0.88          |
| (1,119)  | 1:688:A:ARG:HD2  | 1:675:A:LEU:HG   | 10       | 0.88          |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD13 | 3        | 0.87          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HB2  | 17       | 0.87          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 9        | 0.87          |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:707:A:ARG:HG3  | 1        | 0.87          |
| (1,261)  | 1:638:A:LEU:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 8        | 0.87          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 13       | 0.87          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG22 | 4        | 0.86          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 11       | 0.86          |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB2  | 20       | 0.86          |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG22 | 2        | 0.86          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 11       | 0.86          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 15       | 0.86          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 19       | 0.86          |
| (1,305)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HD2  | 6        | 0.86          |
| (1,281)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:685:A:ASP:HB2  | 4        | 0.86          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 20       | 0.86          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 18       | 0.85          |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 6        | 0.85          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 2        | 0.85          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HD2  | 9        | 0.85          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 7        | 0.85          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:708:A:LEU:HD11 | 5        | 0.85          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE3  | 5        | 0.85          |
| (1,302)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:703:A:ALA:HB1  | 8        | 0.85          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 17       | 0.85          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 9        | 0.85          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 16       | 0.85          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HB2  | 11       | 0.84          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 13       | 0.84          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,75)   | 1:628:A:PRO:HG2  | 1:657:A:ASP:HB2  | 1        | 0.84          |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 8        | 0.84          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 3        | 0.84          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 4        | 0.84          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 8        | 0.84          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 12       | 0.84          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 18       | 0.84          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 19       | 0.84          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB3  | 2        | 0.84          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 9        | 0.84          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HG3  | 15       | 0.84          |
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:636:A:GLU:HG2  | 17       | 0.84          |
| (1,346)  | 1:696:A:ALA:HB3  | 1:668:A:LEU:HD21 | 6        | 0.84          |
| (1,346)  | 1:696:A:ALA:HB1  | 1:668:A:LEU:HD23 | 17       | 0.84          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:715:A:LYS:HD2  | 18       | 0.84          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 6        | 0.84          |
| (1,242)  | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:672:A:ALA:HA   | 4        | 0.84          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 3        | 0.84          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 7        | 0.84          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 5        | 0.83          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 18       | 0.83          |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 13       | 0.83          |
| (1,990)  | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 14       | 0.83          |
| (1,972)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:715:A:LYS:HD2  | 5        | 0.83          |
| (1,667)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 7        | 0.83          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 15       | 0.83          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:663:A:PRO:HA   | 5        | 0.83          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HG3  | 17       | 0.83          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:715:A:LYS:HD2  | 3        | 0.83          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 8        | 0.82          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 14       | 0.82          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HD2  | 4        | 0.82          |
| (1,620)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 4        | 0.82          |
| (1,419)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HB2  | 12       | 0.82          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HG3  | 19       | 0.82          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HG3  | 20       | 0.82          |
| (1,363)  | 1:666:A:MET:HE1  | 1:708:A:LEU:HD12 | 6        | 0.82          |
| (1,351)  | 1:659:A:MET:HE3  | 1:662:A:GLU:HA   | 3        | 0.82          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 13       | 0.82          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD22 | 1:664:A:ARG:HD2  | 13       | 0.82          |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:638:A:LEU:HD23 | 15       | 0.81          |
| (3,55)   | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 2        | 0.81          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 4        | 0.81          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 16       | 0.81          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:706:A:GLY:HA3  | 3        | 0.81          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 1        | 0.81          |
| (1,488)  | 1:665:A:TYR:HB3  | 1:668:A:LEU:HD22 | 6        | 0.81          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 4        | 0.81          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG22 | 12       | 0.8           |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 19       | 0.8           |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD12 | 7        | 0.8           |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 5        | 0.8           |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 2        | 0.8           |
| (1,615)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:645:A:LEU:H    | 14       | 0.8           |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HG3  | 11       | 0.8           |
| (1,353)  | 1:704:A:MET:HE2  | 1:704:A:MET:HA   | 14       | 0.8           |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 9        | 0.8           |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 9        | 0.8           |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 2        | 0.79          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE3  | 13       | 0.79          |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD13 | 4        | 0.79          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 8        | 0.79          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 11       | 0.79          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 12       | 0.79          |
| (3,92)   | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:648:A:THR:HG22 | 14       | 0.79          |
| (3,92)   | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HG   | 15       | 0.79          |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 12       | 0.79          |
| (1,972)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:715:A:LYS:HD2  | 8        | 0.79          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 18       | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 1        | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 4        | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 6        | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 7        | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 11       | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 15       | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 17       | 0.79          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 20       | 0.79          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 8        | 0.79          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 5        | 0.79          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 12       | 0.79          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HG3  | 1        | 0.79          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 6        | 0.79          |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 18       | 0.79          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 9        | 0.78          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,99)   | 1:663:A:PRO:HB3  | 1:708:A:LEU:HB3  | 20       | 0.78          |
| (3,89)   | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HG3  | 10       | 0.78          |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 10       | 0.78          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 18       | 0.78          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 7        | 0.78          |
| (1,1160) | 1:722:A:GLN:H    | 1:686:A:PRO:HB2  | 12       | 0.78          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 2        | 0.78          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 3        | 0.78          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 5        | 0.78          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 13       | 0.78          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 19       | 0.78          |
| (1,788)  | 1:671:A:GLU:H    | 1:670:A:ARG:HB2  | 1        | 0.78          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 3        | 0.78          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 12       | 0.78          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 14       | 0.78          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 16       | 0.78          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HG3  | 5        | 0.78          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 13       | 0.78          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 2        | 0.78          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HB3  | 3        | 0.78          |
| (1,302)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:703:A:ALA:HB1  | 6        | 0.78          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 13       | 0.78          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 18       | 0.78          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 6        | 0.77          |
| (3,80)   | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:665:A:TYR:HB3  | 18       | 0.77          |
| (2,2)    | 1:691:A:ASP:HB2  | 1:695:A:GLN:HG2  | 12       | 0.77          |
| (1,997)  | 1:643:A:THR:H    | 1:643:A:THR:HG22 | 16       | 0.77          |
| (1,990)  | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 6        | 0.77          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 8        | 0.77          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 9        | 0.77          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 12       | 0.77          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 14       | 0.77          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 16       | 0.77          |
| (1,887)  | 1:701:A:MET:H    | 1:701:A:MET:HB2  | 18       | 0.77          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 12       | 0.77          |
| (1,803)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HB3  | 1        | 0.77          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 6        | 0.77          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 17       | 0.77          |
| (1,520)  | 1:637:A:ALA:HA   | 1:638:A:LEU:HD22 | 18       | 0.77          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 5        | 0.77          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB3  | 7        | 0.77          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 16       | 0.77          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,493) | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 19       | 0.77          |
| (1,489) | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HG3  | 13       | 0.77          |
| (1,377) | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:708:A:LEU:HD11 | 9        | 0.77          |
| (1,377) | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:708:A:LEU:HD12 | 13       | 0.77          |
| (1,267) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 2        | 0.77          |
| (1,71)  | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 9        | 0.77          |
| (3,396) | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 16       | 0.76          |
| (3,228) | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 15       | 0.76          |
| (3,170) | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HB2  | 5        | 0.76          |
| (3,27)  | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG2  | 14       | 0.76          |
| (1,898) | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 18       | 0.76          |
| (1,826) | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 19       | 0.76          |
| (1,523) | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HZ3  | 8        | 0.76          |
| (1,495) | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB2  | 10       | 0.76          |
| (1,414) | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HG3  | 2        | 0.76          |
| (1,360) | 1:674:A:MET:HE1  | 1:682:A:LEU:HD22 | 17       | 0.76          |
| (3,296) | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 5        | 0.75          |
| (3,122) | 1:699:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HD2  | 15       | 0.75          |
| (3,75)  | 1:628:A:PRO:HG2  | 1:657:A:ASP:HB2  | 8        | 0.75          |
| (3,74)  | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 4        | 0.75          |
| (3,13)  | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD11 | 11       | 0.75          |
| (3,3)   | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 13       | 0.75          |
| (1,508) | 1:625:A:HIS:HB3  | 1:656:A:TYR:HD2  | 9        | 0.75          |
| (1,305) | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HD2  | 8        | 0.75          |
| (1,251) | 1:668:A:LEU:HD23 | 1:664:A:ARG:HD2  | 20       | 0.75          |
| (3,396) | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 14       | 0.74          |
| (3,372) | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 16       | 0.74          |
| (3,371) | 1:694:A:THR:H    | 1:668:A:LEU:HB3  | 15       | 0.74          |
| (3,296) | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 9        | 0.74          |
| (3,228) | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 13       | 0.74          |
| (3,182) | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 3        | 0.74          |
| (3,177) | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:674:A:MET:HA   | 13       | 0.74          |
| (3,130) | 1:634:A:TRP:HB2  | 1:636:A:GLU:HB2  | 2        | 0.74          |
| (3,122) | 1:699:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HD2  | 8        | 0.74          |
| (3,74)  | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 18       | 0.74          |
| (3,46)  | 1:684:A:LYS:HE2  | 1:686:A:PRO:HG2  | 12       | 0.74          |
| (2,3)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:724:A:GLU:HG2  | 1        | 0.74          |
| (1,898) | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 5        | 0.74          |
| (1,826) | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 5        | 0.74          |
| (1,826) | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 15       | 0.74          |
| (1,803) | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HB3  | 17       | 0.74          |
| (1,347) | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE1  | 6        | 0.74          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 8        | 0.74          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 18       | 0.74          |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 4        | 0.74          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 16       | 0.73          |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 18       | 0.73          |
| (3,191)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:643:A:THR:HG22 | 14       | 0.73          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 9        | 0.73          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 3        | 0.73          |
| (3,77)   | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HA   | 2        | 0.73          |
| (3,3)    | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 5        | 0.73          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 15       | 0.73          |
| (1,898)  | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 10       | 0.73          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 5        | 0.73          |
| (1,842)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 15       | 0.73          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 1        | 0.73          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 10       | 0.73          |
| (1,727)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:723:A:MET:H    | 17       | 0.73          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 19       | 0.73          |
| (1,395)  | 1:669:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD21 | 10       | 0.73          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD21 | 16       | 0.73          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 6        | 0.72          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 7        | 0.72          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 7        | 0.72          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:711:A:GLN:HB2  | 19       | 0.72          |
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 8        | 0.72          |
| (3,78)   | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HB2  | 17       | 0.72          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 9        | 0.72          |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H    | 1:644:A:ALA:HB1  | 3        | 0.72          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 9        | 0.72          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 10       | 0.72          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 17       | 0.72          |
| (1,898)  | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 2        | 0.72          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 4        | 0.72          |
| (1,770)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:654:A:GLY:HA3  | 7        | 0.72          |
| (1,770)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:654:A:GLY:HA3  | 8        | 0.72          |
| (1,502)  | 1:659:A:MET:HE1  | 1:705:A:LYS:HE2  | 9        | 0.72          |
| (1,243)  | 1:675:A:LEU:HD22 | 1:671:A:GLU:HG3  | 4        | 0.72          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 3        | 0.72          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 7        | 0.72          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 10       | 0.72          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 11       | 0.72          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 10       | 0.72          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:668:A:LEU:HB3  | 5        | 0.71          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 5        | 0.71          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 19       | 0.71          |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:714:A:GLN:HB3  | 16       | 0.71          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HD2  | 11       | 0.71          |
| (2,7)    | 1:651:A:ASP:H    | 1:649:A:ASP:HB3  | 4        | 0.71          |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD23 | 16       | 0.71          |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG23 | 7        | 0.71          |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG21 | 9        | 0.71          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 12       | 0.71          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 14       | 0.71          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 16       | 0.71          |
| (1,898)  | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 4        | 0.71          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 12       | 0.71          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 16       | 0.71          |
| (1,770)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:654:A:GLY:HA3  | 20       | 0.71          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 20       | 0.71          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 5        | 0.71          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 9        | 0.71          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 15       | 0.71          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 17       | 0.71          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 19       | 0.71          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 3        | 0.7           |
| (3,137)  | 1:722:A:GLN:HG2  | 1:725:A:GLU:HB2  | 5        | 0.7           |
| (3,57)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG3  | 11       | 0.7           |
| (1,990)  | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 16       | 0.7           |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 8        | 0.7           |
| (1,803)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HB3  | 15       | 0.7           |
| (1,704)  | 1:684:A:LYS:H    | 1:684:A:LYS:HG2  | 3        | 0.7           |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:632:A:GLN:HB2  | 17       | 0.7           |
| (1,376)  | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:692:A:LEU:HD21 | 6        | 0.7           |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HG2  | 9        | 0.7           |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 2        | 0.7           |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 12       | 0.7           |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 13       | 0.7           |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 14       | 0.7           |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 16       | 0.7           |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD13 | 18       | 0.7           |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 18       | 0.69          |
| (3,130)  | 1:634:A:TRP:HB2  | 1:636:A:GLU:HB2  | 9        | 0.69          |
| (3,124)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:638:A:LEU:HA   | 13       | 0.69          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 2        | 0.69          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 7        | 0.69          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 20       | 0.69          |
| (1,770)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:654:A:GLY:HA3  | 17       | 0.69          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 6        | 0.69          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 7        | 0.69          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 15       | 0.69          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:706:A:GLY:HA3  | 16       | 0.69          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HG3  | 2        | 0.69          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:688:A:ARG:HG3  | 6        | 0.69          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:708:A:LEU:HD11 | 15       | 0.69          |
| (1,355)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:671:A:GLU:HA   | 1        | 0.69          |
| (1,242)  | 1:675:A:LEU:HD23 | 1:672:A:ALA:HA   | 18       | 0.69          |
| (1,153)  | 1:708:A:LEU:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 8        | 0.69          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 12       | 0.68          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 14       | 0.68          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HD2  | 19       | 0.68          |
| (3,68)   | 1:676:A:PHE:HZ   | 1:718:A:GLU:HB2  | 2        | 0.68          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 1        | 0.68          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 6        | 0.68          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 19       | 0.68          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 6        | 0.68          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 20       | 0.68          |
| (1,798)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HA   | 17       | 0.68          |
| (1,754)  | 1:685:A:ASP:H    | 1:675:A:LEU:HD11 | 4        | 0.68          |
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:667:A:MET:HG2  | 2        | 0.68          |
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:667:A:MET:HG2  | 7        | 0.68          |
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:667:A:MET:HG2  | 9        | 0.68          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 11       | 0.68          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB3  | 17       | 0.68          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:708:A:LEU:HD12 | 2        | 0.68          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 17       | 0.68          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE3  | 15       | 0.68          |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE3  | 17       | 0.68          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE3  | 2        | 0.67          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:704:A:MET:HE1  | 14       | 0.67          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB3  | 16       | 0.67          |
| (3,177)  | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:674:A:MET:HA   | 2        | 0.67          |
| (1,1235) | 1:723:A:MET:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 5        | 0.67          |
| (1,979)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 8        | 0.67          |
| (1,667)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 15       | 0.67          |
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:667:A:MET:HG2  | 13       | 0.67          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:691:A:ASP:HB2  | 20       | 0.67          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:708:A:LEU:HD11 | 19       | 0.67          |
| (1,300)  | 1:677:A:THR:HG22 | 1:673:A:GLU:HG3  | 5        | 0.67          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 8        | 0.67          |
| (1,186)  | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 5        | 0.67          |
| (1,116)  | 1:678:A:GLY:HA2  | 1:684:A:LYS:HD2  | 9        | 0.67          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 15       | 0.66          |
| (3,188)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 11       | 0.66          |
| (3,105)  | 1:665:A:TYR:HB2  | 1:668:A:LEU:HD23 | 6        | 0.66          |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:725:A:GLU:HA   | 10       | 0.66          |
| (3,55)   | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 13       | 0.66          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD21 | 10       | 0.66          |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 20       | 0.66          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 17       | 0.66          |
| (1,772)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:655:A:GLU:HB2  | 1        | 0.66          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 13       | 0.66          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:706:A:GLY:HA3  | 14       | 0.66          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 18       | 0.66          |
| (1,186)  | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 20       | 0.66          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 13       | 0.66          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 5        | 0.65          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 17       | 0.65          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB1  | 12       | 0.65          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 13       | 0.65          |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 14       | 0.65          |
| (2,5)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:H    | 20       | 0.65          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 7        | 0.65          |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG21 | 15       | 0.65          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 11       | 0.65          |
| (1,772)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:655:A:GLU:HB2  | 12       | 0.65          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 5        | 0.65          |
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:667:A:MET:HG2  | 3        | 0.65          |
| (1,500)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:667:A:MET:HG2  | 14       | 0.65          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB2  | 10       | 0.65          |
| (1,493)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:669:A:ALA:HB1  | 15       | 0.65          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 18       | 0.65          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HD2  | 20       | 0.65          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HG3  | 20       | 0.65          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 7        | 0.65          |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD23 | 6        | 0.65          |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD21 | 11       | 0.65          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 18       | 0.64          |
| (3,289)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HB3  | 16       | 0.64          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,147) | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 6        | 0.64          |
| (1,990) | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 8        | 0.64          |
| (1,988) | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG21 | 5        | 0.64          |
| (1,988) | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG22 | 14       | 0.64          |
| (1,868) | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 14       | 0.64          |
| (1,868) | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 16       | 0.64          |
| (1,868) | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 19       | 0.64          |
| (1,826) | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 18       | 0.64          |
| (1,528) | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HA   | 5        | 0.64          |
| (1,392) | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 2        | 0.64          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD22 | 1        | 0.64          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD22 | 2        | 0.64          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD23 | 12       | 0.64          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD21 | 17       | 0.64          |
| (3,371) | 1:694:A:THR:H    | 1:668:A:LEU:HB3  | 6        | 0.63          |
| (3,228) | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG21 | 6        | 0.63          |
| (3,170) | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 15       | 0.63          |
| (3,147) | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 20       | 0.63          |
| (3,129) | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 10       | 0.63          |
| (2,6)   | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 7        | 0.63          |
| (1,972) | 1:717:A:GLU:H    | 1:715:A:LYS:HD2  | 11       | 0.63          |
| (1,868) | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 6        | 0.63          |
| (1,709) | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 6        | 0.63          |
| (1,701) | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 2        | 0.63          |
| (1,660) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 9        | 0.63          |
| (1,604) | 1:634:A:TRP:HE1  | 1:635:A:LEU:HD13 | 6        | 0.63          |
| (1,581) | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 8        | 0.63          |
| (1,506) | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 8        | 0.63          |
| (1,489) | 1:674:A:MET:HE2  | 1:670:A:ARG:HG3  | 9        | 0.63          |
| (1,392) | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 12       | 0.63          |
| (1,353) | 1:704:A:MET:HE1  | 1:704:A:MET:HA   | 13       | 0.63          |
| (1,299) | 1:694:A:THR:HG22 | 1:716:A:ALA:HB2  | 12       | 0.63          |
| (1,151) | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 6        | 0.63          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD23 | 4        | 0.63          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD21 | 7        | 0.63          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD21 | 8        | 0.63          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD21 | 9        | 0.63          |
| (1,28)  | 1:648:A:THR:HA   | 1:648:A:THR:HG23 | 11       | 0.63          |
| (3,396) | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 11       | 0.62          |
| (3,296) | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 7        | 0.62          |
| (3,182) | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 9        | 0.62          |
| (3,170) | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HB2  | 6        | 0.62          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,99)  | 1:663:A:PRO:HB3  | 1:708:A:LEU:HB3  | 4        | 0.62          |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:665:A:TYR:HB3  | 14       | 0.62          |
| (1,868) | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 17       | 0.62          |
| (1,770) | 1:655:A:GLU:H    | 1:654:A:GLY:HA3  | 10       | 0.62          |
| (1,620) | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 5        | 0.62          |
| (1,617) | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 4        | 0.62          |
| (1,576) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 14       | 0.62          |
| (1,377) | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:708:A:LEU:HD11 | 3        | 0.62          |
| (1,341) | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 9        | 0.62          |
| (1,302) | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:703:A:ALA:HB1  | 11       | 0.62          |
| (1,246) | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HB2  | 11       | 0.62          |
| (1,244) | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD22 | 11       | 0.62          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD21 | 13       | 0.62          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD22 | 15       | 0.62          |
| (1,70)  | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE3  | 20       | 0.62          |
| (3,296) | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 19       | 0.61          |
| (3,209) | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 11       | 0.61          |
| (3,164) | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:685:A:ASP:HB3  | 11       | 0.61          |
| (3,124) | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:638:A:LEU:HA   | 6        | 0.61          |
| (3,119) | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 6        | 0.61          |
| (3,3)   | 1:693:A:TYR:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 9        | 0.61          |
| (1,987) | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE2  | 10       | 0.61          |
| (1,868) | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 4        | 0.61          |
| (1,866) | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 3        | 0.61          |
| (1,660) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 13       | 0.61          |
| (1,506) | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 18       | 0.61          |
| (1,422) | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:636:A:GLU:HB2  | 19       | 0.61          |
| (1,392) | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 18       | 0.61          |
| (1,341) | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 2        | 0.61          |
| (1,341) | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HA   | 20       | 0.61          |
| (1,300) | 1:677:A:THR:HG21 | 1:673:A:GLU:HG3  | 9        | 0.61          |
| (1,277) | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:707:A:ARG:HG3  | 8        | 0.61          |
| (1,243) | 1:675:A:LEU:HD21 | 1:671:A:GLU:HG3  | 18       | 0.61          |
| (1,151) | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 5        | 0.61          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD23 | 3        | 0.61          |
| (1,132) | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD23 | 18       | 0.61          |
| (1,124) | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 14       | 0.61          |
| (1,14)  | 1:628:A:PRO:HA   | 1:631:A:CYS:HB2  | 1        | 0.61          |
| (3,396) | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 13       | 0.6           |
| (3,372) | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 2        | 0.6           |
| (3,221) | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 15       | 0.6           |
| (3,125) | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:714:A:GLN:HA   | 9        | 0.6           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,77)   | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HA   | 16       | 0.6           |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 19       | 0.6           |
| (3,7)    | 1:631:A:CYS:HA   | 1:634:A:TRP:HB3  | 13       | 0.6           |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 18       | 0.6           |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 16       | 0.6           |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 8        | 0.6           |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB1  | 20       | 0.6           |
| (1,508)  | 1:625:A:HIS:HB3  | 1:656:A:TYR:HD2  | 14       | 0.6           |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 15       | 0.6           |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 10       | 0.6           |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD23 | 5        | 0.6           |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 20       | 0.6           |
| (3,281)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:661:A:ASP:H    | 5        | 0.59          |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:714:A:GLN:HA   | 6        | 0.59          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 8        | 0.59          |
| (1,988)  | 1:648:A:THR:H    | 1:648:A:THR:HG23 | 3        | 0.59          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 1        | 0.59          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 9        | 0.59          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 15       | 0.59          |
| (1,819)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:HA   | 18       | 0.59          |
| (1,770)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:654:A:GLY:HA3  | 1        | 0.59          |
| (1,729)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HB3  | 8        | 0.59          |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB1  | 2        | 0.59          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 11       | 0.59          |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB1  | 1:689:A:SER:HB3  | 5        | 0.59          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HA   | 14       | 0.59          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 19       | 0.59          |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HG2  | 13       | 0.59          |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HG2  | 17       | 0.59          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 6        | 0.59          |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD23 | 14       | 0.59          |
| (1,132)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:645:A:LEU:HD22 | 19       | 0.59          |
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 6        | 0.59          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 1        | 0.58          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 11       | 0.58          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 12       | 0.58          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 14       | 0.58          |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:701:A:MET:HE1  | 10       | 0.58          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 16       | 0.58          |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HB2  | 1        | 0.58          |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:714:A:GLN:HA   | 2        | 0.58          |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:714:A:GLN:HA   | 17       | 0.58          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HD2  | 13       | 0.58          |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:725:A:GLU:HA   | 7        | 0.58          |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 11       | 0.58          |
| (3,13)   | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD12 | 20       | 0.58          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 20       | 0.58          |
| (1,997)  | 1:643:A:THR:H    | 1:643:A:THR:HG23 | 14       | 0.58          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 7        | 0.58          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 12       | 0.58          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 3        | 0.58          |
| (1,727)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:723:A:MET:H    | 15       | 0.58          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 11       | 0.58          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 12       | 0.58          |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB2  | 12       | 0.58          |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB3  | 18       | 0.58          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 17       | 0.58          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 5        | 0.58          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 7        | 0.58          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HA   | 8        | 0.58          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HA   | 11       | 0.58          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 13       | 0.58          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HA   | 18       | 0.58          |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HB2  | 15       | 0.57          |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:714:A:GLN:HA   | 13       | 0.57          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HD2  | 16       | 0.57          |
| (3,57)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG2  | 6        | 0.57          |
| (3,55)   | 1:683:A:GLU:HG2  | 1:684:A:LYS:HA   | 3        | 0.57          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD13 | 6        | 0.57          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD22 | 19       | 0.57          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 3        | 0.57          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 3        | 0.57          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 14       | 0.57          |
| (1,617)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HB1  | 1        | 0.57          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HA   | 13       | 0.57          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 19       | 0.57          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HA   | 1        | 0.57          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 10       | 0.57          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HA   | 12       | 0.57          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HA   | 15       | 0.57          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 10       | 0.57          |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HG2  | 5        | 0.57          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 15       | 0.57          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:704:A:MET:HE3  | 17       | 0.56          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 1        | 0.56          |
| (2,7)    | 1:651:A:ASP:H    | 1:649:A:ASP:HB3  | 10       | 0.56          |
| (1,1190) | 1:719:A:ALA:H    | 1:722:A:GLN:HE22 | 6        | 0.56          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 20       | 0.56          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 4        | 0.56          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 6        | 0.56          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 17       | 0.56          |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 12       | 0.56          |
| (1,605)  | 1:725:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HA   | 12       | 0.56          |
| (1,480)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:627:A:SER:HA   | 4        | 0.56          |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:689:A:SER:HB3  | 8        | 0.56          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HA   | 3        | 0.56          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 5        | 0.56          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 20       | 0.56          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD21 | 2        | 0.56          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 15       | 0.56          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 20       | 0.55          |
| (3,281)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:661:A:ASP:H    | 4        | 0.55          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 16       | 0.55          |
| (3,169)  | 1:673:A:GLU:HA   | 1:715:A:LYS:HD3  | 17       | 0.55          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 18       | 0.55          |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 4        | 0.55          |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD23 | 1:634:A:TRP:HB2  | 7        | 0.55          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 15       | 0.55          |
| (1,893)  | 1:659:A:MET:H    | 1:657:A:ASP:HA   | 12       | 0.55          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 6        | 0.55          |
| (1,852)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:635:A:LEU:HB2  | 9        | 0.55          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 6        | 0.55          |
| (1,620)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 19       | 0.55          |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:666:A:MET:HG2  | 15       | 0.55          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1        | 0.55          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 4        | 0.55          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 20       | 0.54          |
| (3,270)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:661:A:ASP:HB3  | 5        | 0.54          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB3  | 1:711:A:GLN:HB2  | 10       | 0.54          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 2        | 0.54          |
| (3,99)   | 1:663:A:PRO:HB3  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1        | 0.54          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 1        | 0.54          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 4        | 0.54          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 16       | 0.54          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 10       | 0.54          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 7        | 0.54          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 5        | 0.54          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 19       | 0.54          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 1        | 0.54          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 6        | 0.54          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:682:A:LEU:HD22 | 19       | 0.54          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HA   | 6        | 0.54          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HA   | 17       | 0.54          |
| (1,305)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HD2  | 11       | 0.54          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD22 | 1:664:A:ARG:HD2  | 7        | 0.54          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD12 | 1:671:A:GLU:HB2  | 3        | 0.54          |
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 9        | 0.54          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 10       | 0.53          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 16       | 0.53          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:701:A:MET:HE2  | 8        | 0.53          |
| (3,104)  | 1:665:A:TYR:HA   | 1:663:A:PRO:HB3  | 16       | 0.53          |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD22 | 1:634:A:TRP:HB2  | 11       | 0.53          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 2        | 0.53          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 12       | 0.53          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 17       | 0.53          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 19       | 0.53          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 17       | 0.53          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 1        | 0.53          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 2        | 0.53          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 3        | 0.53          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 7        | 0.53          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 9        | 0.53          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 11       | 0.53          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 19       | 0.53          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 14       | 0.53          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 17       | 0.53          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 18       | 0.53          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 3        | 0.53          |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 7        | 0.53          |
| (1,605)  | 1:725:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HA   | 6        | 0.53          |
| (1,522)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:635:A:LEU:HD11 | 16       | 0.53          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 8        | 0.53          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:698:A:GLU:HA   | 16       | 0.53          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB3  | 14       | 0.53          |
| (1,296)  | 1:677:A:THR:HA   | 1:677:A:THR:HG23 | 1        | 0.53          |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:666:A:MET:HG2  | 16       | 0.53          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD12 | 1:671:A:GLU:HB2  | 16       | 0.53          |
| (1,116)  | 1:678:A:GLY:HA2  | 1:684:A:LYS:HD2  | 14       | 0.53          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 5        | 0.53          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 6        | 0.52          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 7        | 0.52          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 15       | 0.52          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 4        | 0.52          |
| (3,78)   | 1:638:A:LEU:HD11 | 1:634:A:TRP:HB2  | 8        | 0.52          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 15       | 0.52          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 9        | 0.52          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 17       | 0.52          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 10       | 0.52          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 13       | 0.52          |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE2  | 13       | 0.52          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 5        | 0.52          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 10       | 0.52          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 12       | 0.52          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 14       | 0.52          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 16       | 0.52          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 17       | 0.52          |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 1        | 0.52          |
| (1,620)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 13       | 0.52          |
| (1,468)  | 1:663:A:PRO:HD3  | 1:659:A:MET:HA   | 15       | 0.52          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HB3  | 18       | 0.52          |
| (1,250)  | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:672:A:ALA:HA   | 15       | 0.52          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD22 | 6        | 0.52          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 7        | 0.52          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 12       | 0.51          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 2        | 0.51          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 13       | 0.51          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD22 | 12       | 0.51          |
| (3,61)   | 1:704:A:MET:HG3  | 1:659:A:MET:HB2  | 1        | 0.51          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD13 | 5        | 0.51          |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 9        | 0.51          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 5        | 0.51          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 14       | 0.51          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 11       | 0.51          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 13       | 0.51          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 15       | 0.51          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 15       | 0.51          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 3        | 0.51          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 20       | 0.51          |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 9        | 0.51          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HA   | 6        | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,417)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:636:A:GLU:HG2  | 19       | 0.51          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD12 | 1:688:A:ARG:HG3  | 13       | 0.51          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:708:A:LEU:HD12 | 14       | 0.51          |
| (1,296)  | 1:677:A:THR:HA   | 1:677:A:THR:HG21 | 18       | 0.51          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD23 | 18       | 0.51          |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:707:A:ARG:HG3  | 15       | 0.51          |
| (1,1)    | 1:659:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 13       | 0.51          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 7        | 0.5           |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 13       | 0.5           |
| (3,228)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:694:A:THR:HG23 | 1        | 0.5           |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:689:A:SER:HB2  | 7        | 0.5           |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1        | 0.5           |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 17       | 0.5           |
| (1,1229) | 1:654:A:GLY:H    | 1:651:A:ASP:HA   | 1        | 0.5           |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 11       | 0.5           |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 1        | 0.5           |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 20       | 0.5           |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 4        | 0.5           |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 18       | 0.5           |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 3        | 0.5           |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 8        | 0.5           |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 20       | 0.5           |
| (1,698)  | 1:637:A:ALA:H    | 1:636:A:GLU:HB2  | 6        | 0.5           |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 14       | 0.5           |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 11       | 0.5           |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 17       | 0.5           |
| (1,620)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 7        | 0.5           |
| (1,376)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 10       | 0.5           |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:682:A:LEU:HD21 | 15       | 0.5           |
| (1,296)  | 1:677:A:THR:HA   | 1:677:A:THR:HG23 | 10       | 0.5           |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HB2  | 2        | 0.5           |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD23 | 7        | 0.5           |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD21 | 19       | 0.5           |
| (1,186)  | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 17       | 0.5           |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 19       | 0.49          |
| (3,306)  | 1:659:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HB2  | 13       | 0.49          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 4        | 0.49          |
| (3,283)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:668:A:LEU:HG   | 18       | 0.49          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 8        | 0.49          |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 10       | 0.49          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HD2  | 17       | 0.49          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 3        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 20       | 0.49          |
| (1,1086) | 1:629:A:ASP:H    | 1:628:A:PRO:HD2  | 19       | 0.49          |
| (1,928)  | 1:627:A:SER:H    | 1:626:A:MET:HA   | 10       | 0.49          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 5        | 0.49          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 14       | 0.49          |
| (1,837)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:645:A:LEU:H    | 9        | 0.49          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 2        | 0.49          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 13       | 0.49          |
| (1,746)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:655:A:GLU:HA   | 15       | 0.49          |
| (1,742)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 8        | 0.49          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 4        | 0.49          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 13       | 0.49          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 8        | 0.49          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 13       | 0.49          |
| (1,698)  | 1:637:A:ALA:H    | 1:636:A:GLU:HB2  | 9        | 0.49          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 4        | 0.49          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 13       | 0.49          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 11       | 0.49          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 10       | 0.49          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 15       | 0.49          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD23 | 9        | 0.49          |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 8        | 0.49          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 17       | 0.48          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 13       | 0.48          |
| (3,68)   | 1:676:A:PHE:HZ   | 1:718:A:GLU:HB2  | 4        | 0.48          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 6        | 0.48          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 12       | 0.48          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 4        | 0.48          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 20       | 0.48          |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:689:A:SER:HB3  | 4        | 0.48          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE1  | 10       | 0.48          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 8        | 0.48          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 14       | 0.48          |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 7        | 0.48          |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 9        | 0.48          |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 15       | 0.48          |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 16       | 0.48          |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 18       | 0.48          |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 19       | 0.48          |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG22 | 3        | 0.48          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HD2  | 5        | 0.47          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 8        | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 6        | 0.47          |
| (3,13)   | 1:695:A:GLN:HA   | 1:692:A:LEU:HD13 | 10       | 0.47          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 10       | 0.47          |
| (1,1043) | 1:665:A:TYR:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 9        | 0.47          |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE3  | 2        | 0.47          |
| (1,777)  | 1:633:A:ASP:H    | 1:633:A:ASP:HB2  | 17       | 0.47          |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 1        | 0.47          |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 2        | 0.47          |
| (1,667)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 5        | 0.47          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 5        | 0.47          |
| (1,645)  | 1:683:A:GLU:H    | 1:683:A:GLU:HB3  | 19       | 0.47          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 10       | 0.47          |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB1  | 19       | 0.47          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:668:A:LEU:HD13 | 8        | 0.47          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD11 | 12       | 0.47          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD12 | 18       | 0.47          |
| (1,341)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:698:A:GLU:HA   | 4        | 0.47          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 11       | 0.47          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 7        | 0.47          |
| (1,289)  | 1:671:A:GLU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD22 | 7        | 0.47          |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:666:A:MET:HG2  | 17       | 0.47          |
| (1,222)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:636:A:GLU:HG2  | 8        | 0.47          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 12       | 0.47          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 2        | 0.47          |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG22 | 6        | 0.47          |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 10       | 0.47          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 12       | 0.46          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 8        | 0.46          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 20       | 0.46          |
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:669:A:ALA:HB2  | 11       | 0.46          |
| (3,147)  | 1:636:A:GLU:HB2  | 1:706:A:GLY:HA2  | 17       | 0.46          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 5        | 0.46          |
| (1,1229) | 1:654:A:GLY:H    | 1:651:A:ASP:HA   | 20       | 0.46          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 2        | 0.46          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 17       | 0.46          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 7        | 0.46          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 12       | 0.46          |
| (1,523)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HZ3  | 2        | 0.46          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 14       | 0.46          |
| (1,452)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:647:A:MET:HA   | 20       | 0.46          |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:708:A:LEU:HD13 | 16       | 0.46          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 6        | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,300) | 1:677:A:THR:HG21 | 1:673:A:GLU:HG3  | 4        | 0.46          |
| (1,299) | 1:694:A:THR:HG21 | 1:716:A:ALA:HB3  | 15       | 0.46          |
| (3,372) | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 3        | 0.45          |
| (3,372) | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 7        | 0.45          |
| (3,326) | 1:643:A:THR:H    | 1:642:A:ASN:H    | 13       | 0.45          |
| (3,296) | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 1        | 0.45          |
| (3,296) | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 2        | 0.45          |
| (3,295) | 1:703:A:ALA:H    | 1:704:A:MET:HE3  | 4        | 0.45          |
| (3,221) | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 10       | 0.45          |
| (3,206) | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 8        | 0.45          |
| (3,77)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:634:A:TRP:HA   | 13       | 0.45          |
| (3,63)  | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 3        | 0.45          |
| (3,63)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:701:A:MET:HB2  | 8        | 0.45          |
| (2,7)   | 1:651:A:ASP:H    | 1:649:A:ASP:HB3  | 11       | 0.45          |
| (1,866) | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 7        | 0.45          |
| (1,865) | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 2        | 0.45          |
| (1,865) | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 7        | 0.45          |
| (1,865) | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 15       | 0.45          |
| (1,865) | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 16       | 0.45          |
| (1,865) | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 18       | 0.45          |
| (1,840) | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 9        | 0.45          |
| (1,729) | 1:724:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HB3  | 11       | 0.45          |
| (1,514) | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 7        | 0.45          |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE2  | 20       | 0.45          |
| (1,421) | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:711:A:GLN:HB2  | 16       | 0.45          |
| (1,377) | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:708:A:LEU:HD13 | 6        | 0.45          |
| (1,362) | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD13 | 5        | 0.45          |
| (1,360) | 1:674:A:MET:HE2  | 1:682:A:LEU:HD21 | 11       | 0.45          |
| (1,354) | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:689:A:SER:HB3  | 13       | 0.45          |
| (1,347) | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE1  | 5        | 0.45          |
| (1,305) | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HD2  | 10       | 0.45          |
| (1,238) | 1:670:A:ARG:HG3  | 1:670:A:ARG:HB2  | 1        | 0.45          |
| (3,372) | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 13       | 0.44          |
| (3,372) | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 20       | 0.44          |
| (3,206) | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 5        | 0.44          |
| (3,147) | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 12       | 0.44          |
| (3,122) | 1:699:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HD2  | 9        | 0.44          |
| (3,63)  | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 1        | 0.44          |
| (3,63)  | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 2        | 0.44          |
| (3,63)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:701:A:MET:HB2  | 4        | 0.44          |
| (3,63)  | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 5        | 0.44          |
| (3,63)  | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 6        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 7        | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 9        | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 10       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:701:A:MET:HG2  | 1:701:A:MET:HB2  | 11       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 12       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 13       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 14       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 15       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 16       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 17       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:701:A:MET:HG2  | 1:701:A:MET:HB2  | 18       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:674:A:MET:HB2  | 1:674:A:MET:HG2  | 19       | 0.44          |
| (3,63)   | 1:701:A:MET:HG2  | 1:701:A:MET:HB2  | 20       | 0.44          |
| (1,1169) | 1:655:A:GLU:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 4        | 0.44          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 8        | 0.44          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 6        | 0.44          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 12       | 0.44          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 17       | 0.44          |
| (1,826)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:667:A:MET:HB2  | 9        | 0.44          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 7        | 0.44          |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 4        | 0.44          |
| (1,620)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 3        | 0.44          |
| (1,620)  | 1:644:A:ALA:H    | 1:643:A:THR:H    | 11       | 0.44          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 10       | 0.44          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 3        | 0.44          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HA   | 9        | 0.44          |
| (1,502)  | 1:659:A:MET:HE2  | 1:705:A:LYS:HE2  | 7        | 0.44          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 16       | 0.44          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD13 | 11       | 0.44          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:682:A:LEU:HD23 | 16       | 0.44          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 11       | 0.44          |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB1  | 1:713:A:TYR:HE2  | 11       | 0.44          |
| (1,300)  | 1:677:A:THR:HG21 | 1:673:A:GLU:HG3  | 20       | 0.44          |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:635:A:LEU:HB2  | 17       | 0.44          |
| (1,267)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:712:A:TYR:HB2  | 17       | 0.44          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD12 | 1:671:A:GLU:HB2  | 13       | 0.44          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD23 | 5        | 0.44          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 2        | 0.44          |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 5        | 0.44          |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 9        | 0.44          |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG22 | 11       | 0.44          |
| (1,22)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG21 | 19       | 0.44          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 2        | 0.43          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 15       | 0.43          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 11       | 0.43          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HD2  | 7        | 0.43          |
| (3,27)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HG2  | 7        | 0.43          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 16       | 0.43          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 14       | 0.43          |
| (1,969)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HB3  | 16       | 0.43          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 10       | 0.43          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 1        | 0.43          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 3        | 0.43          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 8        | 0.43          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 9        | 0.43          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 19       | 0.43          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 9        | 0.43          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 18       | 0.43          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 11       | 0.43          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 16       | 0.43          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 3        | 0.43          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 8        | 0.43          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 11       | 0.43          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 19       | 0.43          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 12       | 0.43          |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:713:A:TYR:HE2  | 14       | 0.43          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 8        | 0.43          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HB2  | 9        | 0.43          |
| (1,186)  | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 6        | 0.43          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 19       | 0.43          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 9        | 0.42          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 11       | 0.42          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 4        | 0.42          |
| (3,161)  | 1:632:A:GLN:HG2  | 1:635:A:LEU:HD11 | 9        | 0.42          |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 13       | 0.42          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 5        | 0.42          |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 13       | 0.42          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 4        | 0.42          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 5        | 0.42          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 13       | 0.42          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 20       | 0.42          |
| (1,772)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:655:A:GLU:HB2  | 3        | 0.42          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 4        | 0.42          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 20       | 0.42          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,698)  | 1:637:A:ALA:H    | 1:636:A:GLU:HB2  | 2        | 0.42          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 1        | 0.42          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 4        | 0.42          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 9        | 0.42          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 13       | 0.42          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 14       | 0.42          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 16       | 0.42          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 17       | 0.42          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 10       | 0.42          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:670:A:ARG:HD2  | 3        | 0.42          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:691:A:ASP:HB2  | 14       | 0.42          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 17       | 0.42          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE2  | 1:668:A:LEU:HD13 | 4        | 0.42          |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:635:A:LEU:HB2  | 15       | 0.42          |
| (1,247)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:672:A:ALA:HB1  | 7        | 0.42          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD21 | 17       | 0.42          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 11       | 0.42          |
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 19       | 0.42          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 10       | 0.41          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:668:A:LEU:HB3  | 10       | 0.41          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 3        | 0.41          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 15       | 0.41          |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 5        | 0.41          |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 9        | 0.41          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 4        | 0.41          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 17       | 0.41          |
| (1,1045) | 1:665:A:TYR:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 8        | 0.41          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 9        | 0.41          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 1        | 0.41          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 18       | 0.41          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 4        | 0.41          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 11       | 0.41          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 14       | 0.41          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 14       | 0.41          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 11       | 0.41          |
| (1,667)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 6        | 0.41          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 12       | 0.41          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 18       | 0.41          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 20       | 0.41          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 16       | 0.41          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 5        | 0.41          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HA   | 19       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:691:A:ASP:HB2  | 7        | 0.41          |
| (1,367)  | 1:720:A:TRP:HA   | 1:723:A:MET:HE3  | 15       | 0.41          |
| (1,351)  | 1:659:A:MET:HE3  | 1:662:A:GLU:HA   | 19       | 0.41          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 18       | 0.41          |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:707:A:ARG:HG3  | 18       | 0.41          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 6        | 0.41          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 4        | 0.4           |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 17       | 0.4           |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 1        | 0.4           |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 19       | 0.4           |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:689:A:SER:HB2  | 8        | 0.4           |
| (3,125)  | 1:684:A:LYS:HG3  | 1:689:A:SER:HB2  | 12       | 0.4           |
| (3,124)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:638:A:LEU:HA   | 7        | 0.4           |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 10       | 0.4           |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 19       | 0.4           |
| (1,1203) | 1:642:A:ASN:H    | 1:640:A:TRP:HA   | 18       | 0.4           |
| (1,868)  | 1:688:A:ARG:H    | 1:687:A:GLN:HB2  | 2        | 0.4           |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 9        | 0.4           |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 16       | 0.4           |
| (1,698)  | 1:637:A:ALA:H    | 1:636:A:GLU:HB2  | 19       | 0.4           |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 2        | 0.4           |
| (1,605)  | 1:725:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HA   | 7        | 0.4           |
| (1,605)  | 1:725:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HA   | 18       | 0.4           |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 5        | 0.4           |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:636:A:GLU:HB2  | 8        | 0.4           |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:708:A:LEU:HD13 | 12       | 0.4           |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:668:A:LEU:HD11 | 1        | 0.4           |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 7        | 0.4           |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HB2  | 1        | 0.4           |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD23 | 8        | 0.4           |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 17       | 0.4           |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 13       | 0.39          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 17       | 0.39          |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 10       | 0.39          |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD22 | 1:634:A:TRP:HB2  | 16       | 0.39          |
| (3,79)   | 1:645:A:LEU:HD13 | 1:645:A:LEU:HG   | 14       | 0.39          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 19       | 0.39          |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 12       | 0.39          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD12 | 3        | 0.39          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 3        | 0.39          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 8        | 0.39          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 7        | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,969)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HB3  | 1        | 0.39          |
| (1,969)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HB3  | 2        | 0.39          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 15       | 0.39          |
| (1,865)  | 1:666:A:MET:H    | 1:666:A:MET:HB3  | 10       | 0.39          |
| (1,772)  | 1:655:A:GLU:H    | 1:655:A:GLU:HB2  | 14       | 0.39          |
| (1,754)  | 1:685:A:ASP:H    | 1:675:A:LEU:HD13 | 18       | 0.39          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 19       | 0.39          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 10       | 0.39          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 10       | 0.39          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 11       | 0.39          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 16       | 0.39          |
| (1,469)  | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB1  | 13       | 0.39          |
| (1,452)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:647:A:MET:HA   | 9        | 0.39          |
| (1,414)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:688:A:ARG:HG3  | 4        | 0.39          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 14       | 0.39          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 14       | 0.38          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 1        | 0.38          |
| (3,178)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:714:A:GLN:HB3  | 2        | 0.38          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HD2  | 3        | 0.38          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:682:A:LEU:HG   | 2        | 0.38          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 6        | 0.38          |
| (3,79)   | 1:645:A:LEU:HD12 | 1:645:A:LEU:HG   | 10       | 0.38          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 15       | 0.38          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:682:A:LEU:HG   | 18       | 0.38          |
| (3,55)   | 1:724:A:GLU:HG2  | 1:725:A:GLU:HA   | 4        | 0.38          |
| (3,28)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HB2  | 15       | 0.38          |
| (1,1012) | 1:704:A:MET:H    | 1:704:A:MET:HG2  | 4        | 0.38          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 17       | 0.38          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 8        | 0.38          |
| (1,933)  | 1:629:A:ASP:H    | 1:628:A:PRO:HA   | 17       | 0.38          |
| (1,892)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:H    | 8        | 0.38          |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 2        | 0.38          |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 10       | 0.38          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 10       | 0.38          |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 16       | 0.38          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 19       | 0.38          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 3        | 0.38          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HA   | 12       | 0.38          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 17       | 0.38          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 2        | 0.38          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB1  | 1:712:A:TYR:HA   | 13       | 0.38          |
| (1,503)  | 1:666:A:MET:HE3  | 1:705:A:LYS:HE2  | 6        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 10       | 0.38          |
| (1,365)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HE2  | 14       | 0.38          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 17       | 0.38          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:716:A:ALA:HB2  | 6        | 0.38          |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:666:A:MET:HG2  | 12       | 0.38          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 6        | 0.37          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 7        | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:682:A:LEU:HG   | 1        | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 3        | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:682:A:LEU:HG   | 4        | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 5        | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:682:A:LEU:HG   | 7        | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 9        | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 11       | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:682:A:LEU:HG   | 12       | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:682:A:LEU:HG   | 16       | 0.37          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 20       | 0.37          |
| (3,44)   | 1:664:A:ARG:HD2  | 1:668:A:LEU:HD12 | 20       | 0.37          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 11       | 0.37          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 13       | 0.37          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 19       | 0.37          |
| (1,852)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:635:A:LEU:HB2  | 2        | 0.37          |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 9        | 0.37          |
| (1,746)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:655:A:GLU:HA   | 6        | 0.37          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 2        | 0.37          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 8        | 0.37          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:HA   | 8        | 0.37          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 18       | 0.37          |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 2        | 0.37          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HA   | 10       | 0.37          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HA   | 3        | 0.37          |
| (1,443)  | 1:702:A:GLU:HB2  | 1:699:A:ALA:HA   | 8        | 0.37          |
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:711:A:GLN:HB2  | 3        | 0.37          |
| (1,416)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:632:A:GLN:HB2  | 20       | 0.37          |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:689:A:SER:HB3  | 7        | 0.37          |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:666:A:MET:HG2  | 19       | 0.37          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD22 | 2        | 0.37          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD21 | 19       | 0.37          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 19       | 0.36          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 5        | 0.36          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 6        | 0.36          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 18       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,166)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:704:A:MET:HA   | 7        | 0.36          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 8        | 0.36          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:682:A:LEU:HG   | 17       | 0.36          |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA   | 1:625:A:HIS:HB3  | 5        | 0.36          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 6        | 0.36          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 20       | 0.36          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 17       | 0.36          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 3        | 0.36          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 17       | 0.36          |
| (1,709)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:698:A:GLU:HB2  | 10       | 0.36          |
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 20       | 0.36          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 9        | 0.36          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 10       | 0.36          |
| (1,553)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HB3  | 20       | 0.36          |
| (1,514)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:634:A:TRP:HZ3  | 15       | 0.36          |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:636:A:GLU:HB2  | 10       | 0.36          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE1  | 1:668:A:LEU:HD13 | 20       | 0.36          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:682:A:LEU:HD22 | 7        | 0.36          |
| (1,315)  | 1:634:A:TRP:HA   | 1:637:A:ALA:HB1  | 6        | 0.36          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:665:A:TYR:HB3  | 9        | 0.36          |
| (1,305)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HD2  | 14       | 0.36          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:716:A:ALA:HB3  | 9        | 0.36          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:716:A:ALA:HB2  | 17       | 0.36          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 3        | 0.36          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 15       | 0.36          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 16       | 0.36          |
| (3,396)  | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 9        | 0.35          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB2  | 19       | 0.35          |
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:669:A:ALA:HB2  | 14       | 0.35          |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD13 | 1:634:A:TRP:HB2  | 17       | 0.35          |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 16       | 0.35          |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:720:A:TRP:HD1  | 15       | 0.35          |
| (3,88)   | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:704:A:MET:HB2  | 4        | 0.35          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 5        | 0.35          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 19       | 0.35          |
| (1,955)  | 1:639:A:HIS:H    | 1:639:A:HIS:HB3  | 8        | 0.35          |
| (1,898)  | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 8        | 0.35          |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 5        | 0.35          |
| (1,829)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:668:A:LEU:HD11 | 6        | 0.35          |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 5        | 0.35          |
| (1,667)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 10       | 0.35          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 12       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 20       | 0.35          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 1        | 0.35          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 14       | 0.35          |
| (1,489)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HG3  | 18       | 0.35          |
| (1,353)  | 1:704:A:MET:HE2  | 1:704:A:MET:HA   | 17       | 0.35          |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB2  | 1:713:A:TYR:HE2  | 8        | 0.35          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 17       | 0.35          |
| (1,286)  | 1:675:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HG2  | 19       | 0.35          |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1:635:A:LEU:HB2  | 9        | 0.35          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HB2  | 17       | 0.35          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1        | 0.35          |
| (1,88)   | 1:672:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD21 | 18       | 0.35          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 9        | 0.34          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 17       | 0.34          |
| (3,296)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 8        | 0.34          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 19       | 0.34          |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD12 | 18       | 0.34          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 13       | 0.34          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 2        | 0.34          |
| (3,170)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:698:A:GLU:HB2  | 4        | 0.34          |
| (3,127)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:673:A:GLU:HB3  | 11       | 0.34          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:672:A:ALA:HB1  | 17       | 0.34          |
| (3,79)   | 1:682:A:LEU:HD13 | 1:682:A:LEU:HG   | 13       | 0.34          |
| (3,28)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HB2  | 6        | 0.34          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 16       | 0.34          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD23 | 11       | 0.34          |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 4        | 0.34          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 19       | 0.34          |
| (1,428)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:635:A:LEU:HA   | 8        | 0.34          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 15       | 0.34          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:682:A:LEU:HD23 | 9        | 0.34          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HB3  | 11       | 0.34          |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD23 | 1:635:A:LEU:HB2  | 8        | 0.34          |
| (1,284)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:635:A:LEU:HB2  | 10       | 0.34          |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:707:A:ARG:HG3  | 5        | 0.34          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 10       | 0.34          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 12       | 0.34          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 12       | 0.34          |
| (1,81)   | 1:659:A:MET:HA   | 1:659:A:MET:HG3  | 2        | 0.34          |
| (1,81)   | 1:659:A:MET:HA   | 1:659:A:MET:HG3  | 5        | 0.34          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 10       | 0.34          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG2  | 4        | 0.33          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 5        | 0.33          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:672:A:ALA:HB2  | 4        | 0.33          |
| (1,1126) | 1:712:A:TYR:H    | 1:711:A:GLN:HB2  | 14       | 0.33          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 15       | 0.33          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 2        | 0.33          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 6        | 0.33          |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 15       | 0.33          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 5        | 0.33          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:692:A:LEU:HB3  | 6        | 0.33          |
| (1,480)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:627:A:SER:HA   | 2        | 0.33          |
| (1,428)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:635:A:LEU:HA   | 10       | 0.33          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:691:A:ASP:HB2  | 13       | 0.33          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 19       | 0.33          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 20       | 0.33          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:668:A:LEU:HD13 | 15       | 0.33          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:682:A:LEU:HD23 | 2        | 0.33          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 20       | 0.33          |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE1  | 5        | 0.33          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG2  | 16       | 0.32          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HD2  | 6        | 0.32          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 18       | 0.32          |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HB2  | 6        | 0.32          |
| (3,41)   | 1:707:A:ARG:HD2  | 1:707:A:ARG:HB2  | 2        | 0.32          |
| (1,1190) | 1:719:A:ALA:H    | 1:722:A:GLN:HE22 | 20       | 0.32          |
| (1,1045) | 1:665:A:TYR:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 18       | 0.32          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 13       | 0.32          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 7        | 0.32          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 8        | 0.32          |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 8        | 0.32          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 1        | 0.32          |
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:711:A:GLN:HB2  | 17       | 0.32          |
| (1,283)  | 1:682:A:LEU:HD22 | 1:674:A:MET:HB2  | 8        | 0.32          |
| (1,211)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:691:A:ASP:HB2  | 12       | 0.32          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 16       | 0.32          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 11       | 0.31          |
| (3,295)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:704:A:MET:HE2  | 9        | 0.31          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 10       | 0.31          |
| (3,256)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:705:A:LYS:HB2  | 1        | 0.31          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 7        | 0.31          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 17       | 0.31          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 18       | 0.31          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 9        | 0.31          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:669:A:ALA:HB2  | 8        | 0.31          |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:689:A:SER:HB2  | 5        | 0.31          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 5        | 0.31          |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD22 | 14       | 0.31          |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD21 | 15       | 0.31          |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD23 | 16       | 0.31          |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD21 | 19       | 0.31          |
| (3,27)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HG2  | 18       | 0.31          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 5        | 0.31          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 19       | 0.31          |
| (1,898)  | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 14       | 0.31          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 2        | 0.31          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 16       | 0.31          |
| (1,515)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:636:A:GLU:HB2  | 14       | 0.31          |
| (1,508)  | 1:625:A:HIS:HB3  | 1:656:A:TYR:HD2  | 12       | 0.31          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 5        | 0.31          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD21 | 5        | 0.31          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD21 | 11       | 0.31          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 12       | 0.31          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD12 | 1:671:A:GLU:HB2  | 14       | 0.31          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 4        | 0.3           |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 10       | 0.3           |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG2  | 12       | 0.3           |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 14       | 0.3           |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 20       | 0.3           |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 2        | 0.3           |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 13       | 0.3           |
| (3,137)  | 1:722:A:GLN:HG2  | 1:725:A:GLU:HB2  | 1        | 0.3           |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 15       | 0.3           |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD21 | 1        | 0.3           |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD22 | 3        | 0.3           |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD22 | 4        | 0.3           |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD22 | 5        | 0.3           |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD23 | 7        | 0.3           |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD23 | 8        | 0.3           |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD23 | 9        | 0.3           |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD23 | 10       | 0.3           |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD23 | 11       | 0.3           |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD22 | 12       | 0.3           |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD22 | 17       | 0.3           |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG   | 1:645:A:LEU:HD22 | 18       | 0.3           |
| (3,82)   | 1:682:A:LEU:HG   | 1:682:A:LEU:HD22 | 20       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,41)   | 1:670:A:ARG:HD2 | 1:670:A:ARG:HB2  | 7        | 0.3           |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2 | 1:711:A:GLN:HE22 | 15       | 0.3           |
| (2,1)    | 1:656:A:TYR:HA  | 1:625:A:HIS:HB3  | 4        | 0.3           |
| (1,1190) | 1:719:A:ALA:H   | 1:722:A:GLN:HE22 | 7        | 0.3           |
| (1,1012) | 1:704:A:MET:H   | 1:704:A:MET:HG2  | 7        | 0.3           |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H   | 1:675:A:LEU:HD22 | 14       | 0.3           |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H   | 1:725:A:GLU:HB2  | 10       | 0.3           |
| (1,933)  | 1:629:A:ASP:H   | 1:628:A:PRO:HA   | 10       | 0.3           |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H   | 1:660:A:GLN:HB3  | 1        | 0.3           |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H   | 1:718:A:GLU:HB2  | 4        | 0.3           |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H   | 1:718:A:GLU:HB2  | 7        | 0.3           |
| (1,527)  | 1:637:A:ALA:HB2 | 1:633:A:ASP:HB2  | 15       | 0.3           |
| (1,430)  | 1:708:A:LEU:HG  | 1:705:A:LYS:HB2  | 4        | 0.3           |
| (1,377)  | 1:700:A:ALA:HB1 | 1:708:A:LEU:HD13 | 18       | 0.3           |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2 | 1:699:A:ALA:HB2  | 2        | 0.3           |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA  | 1:635:A:LEU:HD23 | 12       | 0.3           |
| (1,275)  | 1:708:A:LEU:HA  | 1:708:A:LEU:HD11 | 6        | 0.3           |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA  | 1:682:A:LEU:HD21 | 3        | 0.3           |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA  | 1:682:A:LEU:HD21 | 12       | 0.3           |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2 | 1:675:A:LEU:HD22 | 12       | 0.3           |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2 | 1:675:A:LEU:HD23 | 13       | 0.3           |
| (1,147)  | 1:684:A:LYS:HE2 | 1:677:A:THR:HA   | 19       | 0.3           |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA  | 1:713:A:TYR:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA  | 1:713:A:TYR:HA   | 20       | 0.3           |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2 | 1:699:A:ALA:HB3  | 11       | 0.29          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB1 | 1:638:A:LEU:HD21 | 15       | 0.29          |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG  | 1:645:A:LEU:HD21 | 2        | 0.29          |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG  | 1:645:A:LEU:HD22 | 6        | 0.29          |
| (3,82)   | 1:645:A:LEU:HG  | 1:645:A:LEU:HD23 | 13       | 0.29          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3 | 1:711:A:GLN:HA   | 2        | 0.29          |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA  | 1:640:A:TRP:HB3  | 19       | 0.29          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3 | 1:638:A:LEU:HD13 | 14       | 0.29          |
| (1,1231) | 1:656:A:TYR:H   | 1:626:A:MET:HB3  | 3        | 0.29          |
| (1,1128) | 1:722:A:GLN:H   | 1:644:A:ALA:HB2  | 19       | 0.29          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H   | 1:688:A:ARG:HB2  | 16       | 0.29          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H   | 1:725:A:GLU:HB2  | 9        | 0.29          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H   | 1:660:A:GLN:HB3  | 11       | 0.29          |
| (1,772)  | 1:655:A:GLU:H   | 1:655:A:GLU:HB2  | 6        | 0.29          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H   | 1:709:A:ALA:HB3  | 9        | 0.29          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H   | 1:709:A:ALA:HB1  | 13       | 0.29          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H   | 1:709:A:ALA:HB1  | 18       | 0.29          |
| (1,666)  | 1:692:A:LEU:H   | 1:692:A:LEU:HB3  | 5        | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 8        | 0.29          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 9        | 0.29          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:635:A:LEU:HA   | 20       | 0.29          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1:691:A:ASP:HB2  | 8        | 0.29          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:682:A:LEU:HD21 | 13       | 0.29          |
| (1,301)  | 1:643:A:THR:HG22 | 1:646:A:GLU:HG2  | 1        | 0.29          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD23 | 20       | 0.29          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD21 | 18       | 0.29          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD21 | 20       | 0.29          |
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 12       | 0.29          |
| (1,88)   | 1:672:A:ALA:HA   | 1:692:A:LEU:HD22 | 4        | 0.29          |
| (3,372)  | 1:636:A:GLU:H    | 1:634:A:TRP:H    | 18       | 0.28          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG2  | 1        | 0.28          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 8        | 0.28          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 13       | 0.28          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 16       | 0.28          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 11       | 0.28          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:711:A:GLN:HB2  | 15       | 0.28          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB3  | 3        | 0.28          |
| (3,77)   | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:634:A:TRP:HA   | 19       | 0.28          |
| (3,68)   | 1:676:A:PHE:HZ   | 1:718:A:GLU:HB2  | 5        | 0.28          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 8        | 0.28          |
| (1,972)  | 1:717:A:GLU:H    | 1:715:A:LYS:HD2  | 16       | 0.28          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 8        | 0.28          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 1        | 0.28          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 3        | 0.28          |
| (1,729)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HB3  | 17       | 0.28          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 5        | 0.28          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 19       | 0.28          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 7        | 0.28          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1:712:A:TYR:HA   | 7        | 0.28          |
| (1,452)  | 1:645:A:LEU:HB2  | 1:647:A:MET:HA   | 19       | 0.28          |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:689:A:SER:HB3  | 15       | 0.28          |
| (1,349)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:659:A:MET:HE2  | 13       | 0.28          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 3        | 0.28          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 9        | 0.28          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 20       | 0.28          |
| (1,311)  | 1:703:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HB3  | 13       | 0.28          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD23 | 1:664:A:ARG:HD2  | 2        | 0.28          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD22 | 1:664:A:ARG:HD2  | 15       | 0.28          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD12 | 1:671:A:GLU:HB2  | 19       | 0.28          |
| (1,104)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 13       | 0.28          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 4        | 0.28          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 12       | 0.28          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 15       | 0.28          |
| (3,326)  | 1:643:A:THR:H    | 1:642:A:ASN:H    | 11       | 0.27          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 11       | 0.27          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG3  | 2        | 0.27          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 2        | 0.27          |
| (3,127)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:673:A:GLU:HB3  | 18       | 0.27          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 12       | 0.27          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 4        | 0.27          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:714:A:GLN:HB2  | 15       | 0.27          |
| (3,75)   | 1:628:A:PRO:HG2  | 1:657:A:ASP:HB2  | 14       | 0.27          |
| (1,1046) | 1:658:A:GLY:H    | 1:657:A:ASP:HA   | 7        | 0.27          |
| (1,1005) | 1:689:A:SER:H    | 1:684:A:LYS:HA   | 14       | 0.27          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 11       | 0.27          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 12       | 0.27          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 14       | 0.27          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 17       | 0.27          |
| (1,800)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HB2  | 15       | 0.27          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 9        | 0.27          |
| (1,421)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:711:A:GLN:HB2  | 5        | 0.27          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE2  | 1:682:A:LEU:HD22 | 3        | 0.27          |
| (1,354)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:689:A:SER:HB3  | 9        | 0.27          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE3  | 12       | 0.27          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 5        | 0.27          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 19       | 0.27          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB3  | 11       | 0.27          |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:707:A:ARG:HG3  | 17       | 0.27          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD22 | 9        | 0.27          |
| (1,260)  | 1:682:A:LEU:HD12 | 1:674:A:MET:HE1  | 17       | 0.27          |
| (1,215)  | 1:670:A:ARG:HD2  | 1:670:A:ARG:HB2  | 3        | 0.27          |
| (1,211)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:691:A:ASP:HB2  | 10       | 0.27          |
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 3        | 0.27          |
| (3,289)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HG   | 19       | 0.26          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG2  | 3        | 0.26          |
| (3,248)  | 1:673:A:GLU:H    | 1:673:A:GLU:HG2  | 11       | 0.26          |
| (3,177)  | 1:680:A:TYR:HD2  | 1:674:A:MET:HA   | 15       | 0.26          |
| (3,127)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:673:A:GLU:HB3  | 19       | 0.26          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 9        | 0.26          |
| (3,92)   | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:648:A:THR:HG23 | 19       | 0.26          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 10       | 0.26          |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 19       | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,41)   | 1:707:A:ARG:HD2  | 1:707:A:ARG:HB2  | 15       | 0.26          |
| (1,1046) | 1:658:A:GLY:H    | 1:657:A:ASP:HA   | 6        | 0.26          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 5        | 0.26          |
| (1,892)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:H    | 10       | 0.26          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 14       | 0.26          |
| (1,829)  | 1:668:A:LEU:H    | 1:668:A:LEU:HD11 | 17       | 0.26          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 10       | 0.26          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 13       | 0.26          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 14       | 0.26          |
| (1,746)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:655:A:GLU:HA   | 3        | 0.26          |
| (1,746)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:655:A:GLU:HA   | 18       | 0.26          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 9        | 0.26          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 19       | 0.26          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:691:A:ASP:HB2  | 9        | 0.26          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:691:A:ASP:HB2  | 11       | 0.26          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 3        | 0.26          |
| (1,347)  | 1:665:A:TYR:H    | 1:659:A:MET:HE2  | 16       | 0.26          |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 19       | 0.26          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB1  | 3        | 0.26          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:716:A:ALA:HB2  | 4        | 0.26          |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:666:A:MET:HG2  | 5        | 0.26          |
| (1,246)  | 1:692:A:LEU:HD13 | 1:671:A:GLU:HB2  | 4        | 0.26          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD21 | 14       | 0.26          |
| (1,211)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:691:A:ASP:HB2  | 15       | 0.26          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 3        | 0.26          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 1        | 0.25          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:715:A:LYS:HB2  | 20       | 0.25          |
| (3,122)  | 1:699:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HD2  | 2        | 0.25          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 8        | 0.25          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 17       | 0.25          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (3,27)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG3  | 20       | 0.25          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 7        | 0.25          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 19       | 0.25          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 5        | 0.25          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 16       | 0.25          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 5        | 0.25          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 13       | 0.25          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 14       | 0.25          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 12       | 0.25          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 15       | 0.25          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:635:A:LEU:HA   | 4        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,282)  | 1:675:A:LEU:HD13 | 1:685:A:ASP:HB3  | 2        | 0.25          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,215)  | 1:670:A:ARG:HD2  | 1:670:A:ARG:HB2  | 1        | 0.25          |
| (1,215)  | 1:670:A:ARG:HD2  | 1:670:A:ARG:HB2  | 5        | 0.25          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,47)   | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,1)    | 1:659:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 9        | 0.25          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 17       | 0.24          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 19       | 0.24          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB3  | 9        | 0.24          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:672:A:ALA:HB1  | 20       | 0.24          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 3        | 0.24          |
| (1,987)  | 1:648:A:THR:H    | 1:647:A:MET:HE1  | 3        | 0.24          |
| (1,939)  | 1:723:A:MET:H    | 1:723:A:MET:HG2  | 15       | 0.24          |
| (1,904)  | 1:709:A:ALA:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 20       | 0.24          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 17       | 0.24          |
| (1,748)  | 1:656:A:TYR:H    | 1:656:A:TYR:HB3  | 11       | 0.24          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB2  | 5        | 0.24          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 2        | 0.24          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 15       | 0.24          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 17       | 0.24          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 18       | 0.24          |
| (1,551)  | 1:641:A:TYR:HE2  | 1:638:A:LEU:HD12 | 18       | 0.24          |
| (1,506)  | 1:672:A:ALA:HB2  | 1:712:A:TYR:HA   | 16       | 0.24          |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:636:A:GLU:HB2  | 17       | 0.24          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 7        | 0.24          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB1  | 4        | 0.24          |
| (1,302)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:703:A:ALA:HB1  | 14       | 0.24          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG21 | 1:716:A:ALA:HB2  | 19       | 0.24          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB3  | 20       | 0.24          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,272)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:708:A:LEU:HD11 | 19       | 0.24          |
| (1,215)  | 1:670:A:ARG:HD2  | 1:670:A:ARG:HB2  | 4        | 0.24          |
| (1,151)  | 1:708:A:LEU:HB3  | 1:705:A:LYS:HB2  | 16       | 0.24          |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 3        | 0.24          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 12       | 0.23          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 20       | 0.23          |
| (3,182)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:716:A:ALA:HB3  | 18       | 0.23          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:714:A:GLN:HB2  | 1        | 0.23          |
| (3,93)   | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD13 | 9        | 0.23          |
| (3,57)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG2  | 14       | 0.23          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 20       | 0.23          |
| (3,52)   | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD23 | 15       | 0.23          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD23 | 12       | 0.23          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 4        | 0.23          |
| (1,800)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HB2  | 6        | 0.23          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 9        | 0.23          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 16       | 0.23          |
| (1,727)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:723:A:MET:H    | 3        | 0.23          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 17       | 0.23          |
| (1,715)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:692:A:LEU:HD12 | 7        | 0.23          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 3        | 0.23          |
| (1,654)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 6        | 0.23          |
| (1,605)  | 1:725:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HA   | 20       | 0.23          |
| (1,534)  | 1:641:A:TYR:HD2  | 1:643:A:THR:HG21 | 8        | 0.23          |
| (1,428)  | 1:635:A:LEU:HD11 | 1:635:A:LEU:HA   | 15       | 0.23          |
| (1,392)  | 1:692:A:LEU:HD22 | 1:691:A:ASP:HB2  | 3        | 0.23          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 10       | 0.23          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3  | 1:682:A:LEU:HD22 | 18       | 0.23          |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 5        | 0.23          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 16       | 0.23          |
| (1,314)  | 1:634:A:TRP:HE3  | 1:637:A:ALA:HB1  | 19       | 0.23          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 6        | 0.23          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD22 | 4        | 0.23          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD21 | 20       | 0.23          |
| (1,244)  | 1:688:A:ARG:HB2  | 1:675:A:LEU:HD23 | 3        | 0.23          |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 1        | 0.23          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 17       | 0.23          |
| (1,93)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 14       | 0.23          |
| (1,47)   | 1:641:A:TYR:HA   | 1:638:A:LEU:HD12 | 18       | 0.23          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 3        | 0.22          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 7        | 0.22          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 9        | 0.22          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 10       | 0.22          |
| (3,281)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 3        | 0.22          |
| (3,256)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:705:A:LYS:HB2  | 10       | 0.22          |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 4        | 0.22          |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 16       | 0.22          |
| (3,173)  | 1:650:A:CYS:HB2  | 1:648:A:THR:HG22 | 1        | 0.22          |
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:669:A:ALA:HB1  | 4        | 0.22          |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:720:A:TRP:HD1  | 20       | 0.22          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:714:A:GLN:HB2  | 20       | 0.22          |
| (1,933)  | 1:629:A:ASP:H    | 1:628:A:PRO:HA   | 15       | 0.22          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 8        | 0.22          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 6        | 0.22          |
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 18       | 0.22          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 1        | 0.22          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB1  | 10       | 0.22          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 6        | 0.22          |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 11       | 0.22          |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 9        | 0.22          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:635:A:LEU:HA   | 2        | 0.22          |
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:635:A:LEU:HA   | 16       | 0.22          |
| (1,486)  | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE1  | 15       | 0.22          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 4        | 0.22          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 4        | 0.22          |
| (1,314)  | 1:634:A:TRP:HE3  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1        | 0.22          |
| (1,253)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:635:A:LEU:HD12 | 9        | 0.22          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 18       | 0.22          |
| (1,87)   | 1:700:A:ALA:HA   | 1:709:A:ALA:HB1  | 12       | 0.22          |
| (1,87)   | 1:700:A:ALA:HA   | 1:709:A:ALA:HB1  | 18       | 0.22          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 11       | 0.21          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 12       | 0.21          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 17       | 0.21          |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HA   | 16       | 0.21          |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HA   | 18       | 0.21          |
| (3,188)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 6        | 0.21          |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD11 | 1:634:A:TRP:HB2  | 19       | 0.21          |
| (3,125)  | 1:684:A:LYS:HG3  | 1:689:A:SER:HB2  | 20       | 0.21          |
| (3,124)  | 1:635:A:LEU:HD22 | 1:638:A:LEU:HA   | 15       | 0.21          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB1  | 1:672:A:ALA:HB2  | 2        | 0.21          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB1  | 12       | 0.21          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:672:A:ALA:HB1  | 13       | 0.21          |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:720:A:TRP:HD1  | 16       | 0.21          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 16       | 0.21          |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 18       | 0.21          |
| (3,56)   | 1:722:A:GLN:HG3  | 1:719:A:ALA:HA   | 18       | 0.21          |
| (3,44)   | 1:664:A:ARG:HD2  | 1:668:A:LEU:HD13 | 13       | 0.21          |
| (1,1166) | 1:662:A:GLU:H    | 1:661:A:ASP:H    | 11       | 0.21          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD23 | 6        | 0.21          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD22 | 20       | 0.21          |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 11       | 0.21          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 16       | 0.21          |
| (1,823)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:660:A:GLN:HB3  | 3        | 0.21          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 18       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,726)  | 1:672:A:ALA:H    | 1:671:A:GLU:HG3  | 13       | 0.21          |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 13       | 0.21          |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 18       | 0.21          |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB3  | 19       | 0.21          |
| (1,430)  | 1:708:A:LEU:HG   | 1:705:A:LYS:HB2  | 8        | 0.21          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:708:A:LEU:HG   | 6        | 0.21          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 8        | 0.21          |
| (1,333)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:715:A:LYS:HD2  | 10       | 0.21          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 12       | 0.21          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB3  | 1        | 0.21          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:716:A:ALA:HB1  | 10       | 0.21          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA   | 1:635:A:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 15       | 0.21          |
| (3,338)  | 1:654:A:GLY:H    | 1:654:A:GLY:HA2  | 19       | 0.2           |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 2        | 0.2           |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 6        | 0.2           |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 8        | 0.2           |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 19       | 0.2           |
| (3,221)  | 1:664:A:ARG:H    | 1:662:A:GLU:HB3  | 7        | 0.2           |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB1  | 1:638:A:LEU:HD23 | 17       | 0.2           |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 12       | 0.2           |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 13       | 0.2           |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG21 | 2        | 0.2           |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HG23 | 1:643:A:THR:HB   | 7        | 0.2           |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HG22 | 1:643:A:THR:HB   | 8        | 0.2           |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD22 | 11       | 0.2           |
| (1,892)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:H    | 15       | 0.2           |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 12       | 0.2           |
| (1,698)  | 1:637:A:ALA:H    | 1:636:A:GLU:HB2  | 1        | 0.2           |
| (1,656)  | 1:719:A:ALA:H    | 1:718:A:GLU:HB2  | 14       | 0.2           |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 9        | 0.2           |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE3  | 1:663:A:PRO:HA   | 6        | 0.2           |
| (1,495)  | 1:710:A:ASN:H    | 1:637:A:ALA:HB2  | 12       | 0.2           |
| (1,486)  | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE2  | 14       | 0.2           |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 5        | 0.2           |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 10       | 0.2           |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 13       | 0.2           |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 14       | 0.2           |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 15       | 0.2           |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD21 | 10       | 0.2           |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD22 | 16       | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 1        | 0.2           |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 5        | 0.19          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 3        | 0.19          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 14       | 0.19          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB1  | 18       | 0.19          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB2  | 1:672:A:ALA:HB3  | 19       | 0.19          |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB2  | 1:720:A:TRP:HD1  | 5        | 0.19          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 6        | 0.19          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HG22 | 1:643:A:THR:HB   | 11       | 0.19          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HG23 | 1:643:A:THR:HB   | 13       | 0.19          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 20       | 0.19          |
| (3,57)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG2  | 18       | 0.19          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 12       | 0.19          |
| (1,1231) | 1:656:A:TYR:H    | 1:626:A:MET:HB3  | 7        | 0.19          |
| (1,1162) | 1:725:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HB2  | 17       | 0.19          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 20       | 0.19          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 18       | 0.19          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 15       | 0.19          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 19       | 0.19          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 17       | 0.19          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:706:A:GLY:HA3  | 11       | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 2        | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 3        | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 7        | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 9        | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:708:A:LEU:HG   | 11       | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:708:A:LEU:HG   | 12       | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:708:A:LEU:HG   | 18       | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 19       | 0.19          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:708:A:LEU:HG   | 20       | 0.19          |
| (1,428)  | 1:635:A:LEU:HD13 | 1:635:A:LEU:HA   | 17       | 0.19          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1        | 0.19          |
| (1,322)  | 1:665:A:TYR:HD2  | 1:699:A:ALA:HB2  | 13       | 0.19          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB2  | 5        | 0.19          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 12       | 0.19          |
| (1,251)  | 1:668:A:LEU:HD21 | 1:664:A:ARG:HD2  | 17       | 0.19          |
| (1,71)   | 1:655:A:GLU:HA   | 1:626:A:MET:HB3  | 11       | 0.19          |
| (3,338)  | 1:654:A:GLY:H    | 1:654:A:GLY:HA2  | 1        | 0.18          |
| (3,338)  | 1:654:A:GLY:H    | 1:654:A:GLY:HA2  | 14       | 0.18          |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HA   | 1        | 0.18          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 20       | 0.18          |
| (3,125)  | 1:684:A:LYS:HG3  | 1:689:A:SER:HB2  | 18       | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,119) | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 1        | 0.18          |
| (3,94)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 2        | 0.18          |
| (3,92)  | 1:637:A:ALA:HB2  | 1:648:A:THR:HG23 | 4        | 0.18          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG22 | 1:643:A:THR:HB   | 3        | 0.18          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG22 | 1:643:A:THR:HB   | 6        | 0.18          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG21 | 1:643:A:THR:HB   | 10       | 0.18          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG21 | 1:643:A:THR:HB   | 16       | 0.18          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG21 | 1:643:A:THR:HB   | 19       | 0.18          |
| (3,52)  | 1:710:A:ASN:HB3  | 1:638:A:LEU:HD21 | 12       | 0.18          |
| (2,6)   | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 4        | 0.18          |
| (1,904) | 1:709:A:ALA:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 1        | 0.18          |
| (1,859) | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 4        | 0.18          |
| (1,859) | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 19       | 0.18          |
| (1,845) | 1:630:A:ARG:H    | 1:631:A:CYS:H    | 13       | 0.18          |
| (1,781) | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HG2  | 1        | 0.18          |
| (1,780) | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 2        | 0.18          |
| (1,780) | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 7        | 0.18          |
| (1,780) | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 10       | 0.18          |
| (1,654) | 1:657:A:ASP:H    | 1:657:A:ASP:HB2  | 20       | 0.18          |
| (1,651) | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 17       | 0.18          |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE3  | 8        | 0.18          |
| (1,429) | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 1        | 0.18          |
| (1,429) | 1:708:A:LEU:HD12 | 1:708:A:LEU:HG   | 17       | 0.18          |
| (1,360) | 1:674:A:MET:HE1  | 1:682:A:LEU:HD22 | 20       | 0.18          |
| (1,290) | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 5        | 0.18          |
| (1,246) | 1:692:A:LEU:HD11 | 1:671:A:GLU:HB2  | 5        | 0.18          |
| (1,138) | 1:684:A:LYS:HE3  | 1:686:A:PRO:HG3  | 19       | 0.18          |
| (1,93)  | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 2        | 0.18          |
| (1,74)  | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 17       | 0.18          |
| (1,70)  | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE2  | 18       | 0.18          |
| (3,396) | 1:706:A:GLY:H    | 1:703:A:ALA:HA   | 15       | 0.17          |
| (3,287) | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 1        | 0.17          |
| (3,287) | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 4        | 0.17          |
| (3,287) | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 20       | 0.17          |
| (3,148) | 1:706:A:GLY:HA2  | 1:638:A:LEU:HD11 | 6        | 0.17          |
| (3,121) | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD13 | 12       | 0.17          |
| (3,94)  | 1:716:A:ALA:HB2  | 1:714:A:GLN:HB2  | 3        | 0.17          |
| (3,94)  | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 14       | 0.17          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 1        | 0.17          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG23 | 1:643:A:THR:HB   | 5        | 0.17          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HG23 | 1:643:A:THR:HB   | 9        | 0.17          |
| (3,84)  | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 12       | 0.17          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 12       | 0.17          |
| (3,67)   | 1:701:A:MET:HB2  | 1:638:A:LEU:HD22 | 10       | 0.17          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 6        | 0.17          |
| (1,1160) | 1:722:A:GLN:H    | 1:686:A:PRO:HB2  | 10       | 0.17          |
| (1,904)  | 1:709:A:ALA:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 6        | 0.17          |
| (1,904)  | 1:709:A:ALA:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 7        | 0.17          |
| (1,898)  | 1:659:A:MET:H    | 1:659:A:MET:HB2  | 13       | 0.17          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 1        | 0.17          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 7        | 0.17          |
| (1,837)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:645:A:LEU:H    | 19       | 0.17          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 11       | 0.17          |
| (1,729)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HB3  | 16       | 0.17          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 5        | 0.17          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 6        | 0.17          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 13       | 0.17          |
| (1,581)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:HA   | 15       | 0.17          |
| (1,524)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:706:A:GLY:HA3  | 12       | 0.17          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 15       | 0.17          |
| (1,429)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:708:A:LEU:HG   | 16       | 0.17          |
| (1,300)  | 1:677:A:THR:HG23 | 1:673:A:GLU:HG3  | 14       | 0.17          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD23 | 13       | 0.17          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3  | 1:692:A:LEU:HD21 | 2        | 0.17          |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 12       | 0.17          |
| (1,1)    | 1:659:A:MET:HE2  | 1:663:A:PRO:HA   | 8        | 0.17          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 12       | 0.16          |
| (3,325)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:686:A:PRO:HG3  | 3        | 0.16          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 13       | 0.16          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 16       | 0.16          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 16       | 0.16          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2  | 1:638:A:LEU:HB2  | 2        | 0.16          |
| (3,161)  | 1:632:A:GLN:HG3  | 1:635:A:LEU:HD11 | 13       | 0.16          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB1  | 1:714:A:GLN:HB2  | 7        | 0.16          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG22 | 4        | 0.16          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG22 | 18       | 0.16          |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 4        | 0.16          |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 4        | 0.16          |
| (2,5)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:H    | 4        | 0.16          |
| (1,1160) | 1:722:A:GLN:H    | 1:686:A:PRO:HB2  | 13       | 0.16          |
| (1,1046) | 1:658:A:GLY:H    | 1:657:A:ASP:HA   | 16       | 0.16          |
| (1,939)  | 1:723:A:MET:H    | 1:723:A:MET:HG2  | 3        | 0.16          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 2        | 0.16          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 20       | 0.16          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,729)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:724:A:GLU:HB3  | 2        | 0.16          |
| (1,673)  | 1:649:A:ASP:H    | 1:649:A:ASP:HB3  | 18       | 0.16          |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H    | 1:658:A:GLY:H    | 11       | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 2        | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 3        | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 8        | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 10       | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 11       | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 12       | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 14       | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 18       | 0.16          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 19       | 0.16          |
| (1,527)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:633:A:ASP:HB2  | 8        | 0.16          |
| (1,527)  | 1:637:A:ALA:HB3  | 1:633:A:ASP:HB2  | 10       | 0.16          |
| (1,486)  | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE3  | 4        | 0.16          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 3        | 0.16          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD21 | 7        | 0.16          |
| (1,80)   | 1:716:A:ALA:HA   | 1:715:A:LYS:HE2  | 12       | 0.16          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 1        | 0.15          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 4        | 0.15          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 20       | 0.15          |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HG3  | 6        | 0.15          |
| (3,281)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 20       | 0.15          |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HA   | 6        | 0.15          |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD22 | 15       | 0.15          |
| (3,209)  | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD13 | 20       | 0.15          |
| (3,131)  | 1:638:A:LEU:HD11 | 1:634:A:TRP:HB2  | 8        | 0.15          |
| (3,129)  | 1:631:A:CYS:HB2  | 1:634:A:TRP:HB3  | 8        | 0.15          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB3  | 1        | 0.15          |
| (3,98)   | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB1  | 8        | 0.15          |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:720:A:TRP:HD1  | 17       | 0.15          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 19       | 0.15          |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 3        | 0.15          |
| (3,28)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HB2  | 2        | 0.15          |
| (3,27)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG2  | 1        | 0.15          |
| (1,1203) | 1:642:A:ASN:H    | 1:640:A:TRP:HA   | 12       | 0.15          |
| (1,1027) | 1:678:A:GLY:H    | 1:679:A:GLY:HA2  | 4        | 0.15          |
| (1,904)  | 1:709:A:ALA:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 9        | 0.15          |
| (1,895)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:HA2  | 13       | 0.15          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 16       | 0.15          |
| (1,834)  | 1:711:A:GLN:H    | 1:710:A:ASN:HB2  | 1        | 0.15          |
| (1,781)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HG2  | 18       | 0.15          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 20       | 0.15          |
| (1,734)  | 1:634:A:TRP:H    | 1:633:A:ASP:HB2  | 17       | 0.15          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 1        | 0.15          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 4        | 0.15          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 15       | 0.15          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 16       | 0.15          |
| (1,591)  | 1:693:A:TYR:H    | 1:693:A:TYR:HB3  | 20       | 0.15          |
| (1,365)  | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:665:A:TYR:HE2  | 6        | 0.15          |
| (1,362)  | 1:667:A:MET:HE3  | 1:668:A:LEU:HD11 | 3        | 0.15          |
| (1,335)  | 1:697:A:ALA:HB3  | 1:713:A:TYR:HE2  | 9        | 0.15          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 16       | 0.15          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG22 | 1:716:A:ALA:HB3  | 7        | 0.15          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 10       | 0.15          |
| (1,277)  | 1:708:A:LEU:HD13 | 1:707:A:ARG:HG3  | 19       | 0.15          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD23 | 6        | 0.15          |
| (1,260)  | 1:682:A:LEU:HD11 | 1:674:A:MET:HE3  | 10       | 0.15          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 4        | 0.15          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 15       | 0.15          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 20       | 0.15          |
| (1,87)   | 1:700:A:ALA:HA   | 1:709:A:ALA:HB3  | 9        | 0.15          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 3        | 0.15          |
| (1,70)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:723:A:MET:HE1  | 19       | 0.15          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 2        | 0.14          |
| (3,338)  | 1:654:A:GLY:H    | 1:654:A:GLY:HA2  | 17       | 0.14          |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HG2  | 8        | 0.14          |
| (3,289)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HG   | 3        | 0.14          |
| (3,287)  | 1:645:A:LEU:H    | 1:645:A:LEU:HA   | 18       | 0.14          |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HA   | 8        | 0.14          |
| (3,125)  | 1:684:A:LYS:HG3  | 1:689:A:SER:HB2  | 1        | 0.14          |
| (3,94)   | 1:716:A:ALA:HB3  | 1:714:A:GLN:HB2  | 11       | 0.14          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 15       | 0.14          |
| (3,9)    | 1:670:A:ARG:HA   | 1:670:A:ARG:HG2  | 1        | 0.14          |
| (1,1168) | 1:655:A:GLU:H    | 1:656:A:TYR:H    | 20       | 0.14          |
| (1,1026) | 1:695:A:GLN:HE21 | 1:692:A:LEU:HD23 | 2        | 0.14          |
| (1,990)  | 1:687:A:GLN:HE21 | 1:720:A:TRP:HZ2  | 17       | 0.14          |
| (1,895)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:HA2  | 8        | 0.14          |
| (1,895)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:HA2  | 9        | 0.14          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 10       | 0.14          |
| (1,803)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HB3  | 5        | 0.14          |
| (1,800)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HB2  | 9        | 0.14          |
| (1,798)  | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HA   | 7        | 0.14          |
| (1,711)  | 1:699:A:ALA:H    | 1:709:A:ALA:HB3  | 6        | 0.14          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,701)  | 1:652:A:GLU:H    | 1:652:A:GLU:HB3  | 11       | 0.14          |
| (1,608)  | 1:725:A:GLU:H    | 1:725:A:GLU:HB3  | 17       | 0.14          |
| (1,549)  | 1:680:A:TYR:HE2  | 1:680:A:TYR:HA   | 3        | 0.14          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE3  | 1:663:A:PRO:HA   | 18       | 0.14          |
| (1,490)  | 1:674:A:MET:HE1  | 1:670:A:ARG:HD2  | 5        | 0.14          |
| (1,422)  | 1:635:A:LEU:HD12 | 1:636:A:GLU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB1  | 13       | 0.14          |
| (1,290)  | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (1,276)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:666:A:MET:HG2  | 8        | 0.14          |
| (1,274)  | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD22 | 4        | 0.14          |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD23 | 14       | 0.14          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 6        | 0.14          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 8        | 0.14          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 19       | 0.14          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 8        | 0.14          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 18       | 0.13          |
| (3,362)  | 1:692:A:LEU:H    | 1:695:A:GLN:HA   | 10       | 0.13          |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HG3  | 14       | 0.13          |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H    | 1:646:A:GLU:HA   | 13       | 0.13          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:699:A:ALA:HB3  | 1        | 0.13          |
| (3,175)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:699:A:ALA:HA   | 18       | 0.13          |
| (3,125)  | 1:715:A:LYS:HG2  | 1:714:A:GLN:HA   | 14       | 0.13          |
| (3,119)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:710:A:ASN:HB2  | 13       | 0.13          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HA   | 1:643:A:THR:HG23 | 14       | 0.13          |
| (3,74)   | 1:707:A:ARG:HG3  | 1:711:A:GLN:HA   | 6        | 0.13          |
| (3,57)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG3  | 2        | 0.13          |
| (3,28)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HB2  | 8        | 0.13          |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA   | 1:724:A:GLU:HB3  | 18       | 0.13          |
| (3,27)   | 1:630:A:ARG:HA   | 1:632:A:GLN:HG3  | 15       | 0.13          |
| (3,13)   | 1:702:A:GLU:HA   | 1:635:A:LEU:HD11 | 19       | 0.13          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 10       | 0.13          |
| (1,1154) | 1:711:A:GLN:H    | 1:711:A:GLN:HG3  | 17       | 0.13          |
| (1,1045) | 1:665:A:TYR:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 7        | 0.13          |
| (1,1027) | 1:678:A:GLY:H    | 1:679:A:GLY:HA2  | 14       | 0.13          |
| (1,1008) | 1:689:A:SER:H    | 1:675:A:LEU:HD21 | 3        | 0.13          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 19       | 0.13          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 20       | 0.13          |
| (1,904)  | 1:709:A:ALA:H    | 1:708:A:LEU:HB3  | 17       | 0.13          |
| (1,892)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:H    | 5        | 0.13          |
| (1,866)  | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 16       | 0.13          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 13       | 0.13          |
| (1,727)  | 1:724:A:GLU:H    | 1:723:A:MET:H    | 2        | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H   | 1:658:A:GLY:H    | 5        | 0.13          |
| (1,649)  | 1:651:A:ASP:H   | 1:650:A:CYS:HA   | 3        | 0.13          |
| (1,497)  | 1:666:A:MET:HE1 | 1:663:A:PRO:HA   | 2        | 0.13          |
| (1,383)  | 1:686:A:PRO:HG2 | 1:723:A:MET:HG3  | 11       | 0.13          |
| (1,365)  | 1:700:A:ALA:HB2 | 1:665:A:TYR:HE2  | 11       | 0.13          |
| (1,360)  | 1:674:A:MET:HE3 | 1:682:A:LEU:HD22 | 5        | 0.13          |
| (1,280)  | 1:635:A:LEU:HA  | 1:635:A:LEU:HD21 | 1        | 0.13          |
| (1,182)  | 1:671:A:GLU:HG3 | 1:692:A:LEU:HD23 | 11       | 0.13          |
| (1,133)  | 1:675:A:LEU:HB2 | 1:692:A:LEU:HD22 | 13       | 0.13          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA  | 1:713:A:TYR:HA   | 16       | 0.13          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA  | 1:713:A:TYR:HA   | 19       | 0.13          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H   | 1:692:A:LEU:HG   | 16       | 0.12          |
| (3,338)  | 1:654:A:GLY:H   | 1:653:A:GLY:HA2  | 9        | 0.12          |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H   | 1:722:A:GLN:HG2  | 10       | 0.12          |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H   | 1:722:A:GLN:HG3  | 17       | 0.12          |
| (3,289)  | 1:645:A:LEU:H   | 1:645:A:LEU:HG   | 9        | 0.12          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H   | 1:675:A:LEU:HB3  | 5        | 0.12          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H   | 1:675:A:LEU:HB3  | 20       | 0.12          |
| (3,275)  | 1:646:A:GLU:H   | 1:646:A:GLU:HA   | 4        | 0.12          |
| (3,206)  | 1:712:A:TYR:HE2 | 1:699:A:ALA:HB1  | 9        | 0.12          |
| (3,196)  | 1:634:A:TRP:HZ2 | 1:638:A:LEU:HB2  | 3        | 0.12          |
| (3,189)  | 1:641:A:TYR:HE2 | 1:714:A:GLN:HG2  | 19       | 0.12          |
| (3,175)  | 1:700:A:ALA:HB3 | 1:699:A:ALA:HA   | 5        | 0.12          |
| (3,169)  | 1:715:A:LYS:HD3 | 1:719:A:ALA:HA   | 13       | 0.12          |
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2 | 1:669:A:ALA:HB1  | 19       | 0.12          |
| (3,162)  | 1:712:A:TYR:HE2 | 1:669:A:ALA:HB1  | 20       | 0.12          |
| (3,147)  | 1:706:A:GLY:HA2 | 1:711:A:GLN:HB2  | 9        | 0.12          |
| (3,95)   | 1:719:A:ALA:HB1 | 1:720:A:TRP:HD1  | 4        | 0.12          |
| (3,87)   | 1:713:A:TYR:HE2 | 1:709:A:ALA:HB3  | 17       | 0.12          |
| (3,84)   | 1:643:A:THR:HA  | 1:643:A:THR:HG21 | 17       | 0.12          |
| (3,28)   | 1:722:A:GLN:HA  | 1:724:A:GLU:HB3  | 7        | 0.12          |
| (1,1160) | 1:722:A:GLN:H   | 1:686:A:PRO:HB2  | 3        | 0.12          |
| (1,1032) | 1:653:A:GLY:H   | 1:653:A:GLY:HA2  | 20       | 0.12          |
| (1,1005) | 1:689:A:SER:H   | 1:684:A:LYS:HA   | 2        | 0.12          |
| (1,895)  | 1:659:A:MET:H   | 1:658:A:GLY:HA2  | 7        | 0.12          |
| (1,837)  | 1:646:A:GLU:H   | 1:645:A:LEU:H    | 14       | 0.12          |
| (1,821)  | 1:660:A:GLN:H   | 1:660:A:GLN:HG2  | 20       | 0.12          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H   | 1:705:A:LYS:HB3  | 1        | 0.12          |
| (1,780)  | 1:705:A:LYS:H   | 1:705:A:LYS:HB3  | 4        | 0.12          |
| (1,660)  | 1:662:A:GLU:H   | 1:661:A:ASP:HA   | 18       | 0.12          |
| (1,651)  | 1:657:A:ASP:H   | 1:658:A:GLY:H    | 12       | 0.12          |
| (1,605)  | 1:725:A:GLU:H   | 1:724:A:GLU:HA   | 9        | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,528)  | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 18       | 0.12          |
| (1,480)  | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:627:A:SER:HA   | 9        | 0.12          |
| (1,312)  | 1:701:A:MET:HG2  | 1:709:A:ALA:HB1  | 18       | 0.12          |
| (1,299)  | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB1  | 16       | 0.12          |
| (1,124)  | 1:668:A:LEU:HB3  | 1:692:A:LEU:HD22 | 4        | 0.12          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 3        | 0.12          |
| (1,121)  | 1:630:A:ARG:HD2  | 1:630:A:ARG:HG2  | 12       | 0.12          |
| (1,74)   | 1:709:A:ALA:HA   | 1:713:A:TYR:HA   | 11       | 0.12          |
| (3,371)  | 1:694:A:THR:H    | 1:692:A:LEU:HG   | 13       | 0.11          |
| (3,324)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:722:A:GLN:HG2  | 5        | 0.11          |
| (3,283)  | 1:676:A:PHE:H    | 1:675:A:LEU:HB3  | 15       | 0.11          |
| (3,256)  | 1:708:A:LEU:H    | 1:705:A:LYS:HB2  | 7        | 0.11          |
| (3,188)  | 1:665:A:TYR:HE2  | 1:705:A:LYS:HD2  | 13       | 0.11          |
| (3,175)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:699:A:ALA:HA   | 10       | 0.11          |
| (3,175)  | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:699:A:ALA:HA   | 12       | 0.11          |
| (3,175)  | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:699:A:ALA:HA   | 14       | 0.11          |
| (3,175)  | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:699:A:ALA:HA   | 17       | 0.11          |
| (3,164)  | 1:719:A:ALA:HB1  | 1:717:A:GLU:HG2  | 14       | 0.11          |
| (3,121)  | 1:709:A:ALA:HB2  | 1:638:A:LEU:HD23 | 16       | 0.11          |
| (3,83)   | 1:638:A:LEU:HD21 | 1:634:A:TRP:HB2  | 2        | 0.11          |
| (3,72)   | 1:637:A:ALA:HA   | 1:640:A:TRP:HB3  | 14       | 0.11          |
| (3,68)   | 1:676:A:PHE:HZ   | 1:718:A:GLU:HB2  | 6        | 0.11          |
| (3,68)   | 1:676:A:PHE:HZ   | 1:718:A:GLU:HB2  | 19       | 0.11          |
| (3,17)   | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:712:A:TYR:HA   | 2        | 0.11          |
| (3,17)   | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:712:A:TYR:HA   | 6        | 0.11          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 6        | 0.11          |
| (2,6)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:711:A:GLN:HE22 | 19       | 0.11          |
| (2,5)    | 1:712:A:TYR:HE2  | 1:665:A:TYR:H    | 15       | 0.11          |
| (2,4)    | 1:664:A:ARG:HG2  | 1:663:A:PRO:HB3  | 4        | 0.11          |
| (1,1190) | 1:719:A:ALA:H    | 1:722:A:GLN:HE22 | 14       | 0.11          |
| (1,1168) | 1:655:A:GLU:H    | 1:656:A:TYR:H    | 8        | 0.11          |
| (1,1154) | 1:711:A:GLN:H    | 1:711:A:GLN:HG3  | 3        | 0.11          |
| (1,1154) | 1:711:A:GLN:H    | 1:711:A:GLN:HG3  | 5        | 0.11          |
| (1,1045) | 1:665:A:TYR:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 6        | 0.11          |
| (1,1007) | 1:689:A:SER:H    | 1:688:A:ARG:HB2  | 9        | 0.11          |
| (1,994)  | 1:643:A:THR:H    | 1:642:A:ASN:HA   | 5        | 0.11          |
| (1,970)  | 1:722:A:GLN:H    | 1:725:A:GLU:HB2  | 7        | 0.11          |
| (1,895)  | 1:659:A:MET:H    | 1:658:A:GLY:HA2  | 16       | 0.11          |
| (1,891)  | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 9        | 0.11          |
| (1,878)  | 1:680:A:TYR:H    | 1:679:A:GLY:HA2  | 14       | 0.11          |
| (1,859)  | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 5        | 0.11          |
| (1,840)  | 1:718:A:GLU:H    | 1:717:A:GLU:HB3  | 6        | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,834) | 1:711:A:GLN:H    | 1:710:A:ASN:HB2  | 6        | 0.11          |
| (1,800) | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HB2  | 7        | 0.11          |
| (1,800) | 1:661:A:ASP:H    | 1:660:A:GLN:HB2  | 12       | 0.11          |
| (1,780) | 1:705:A:LYS:H    | 1:705:A:LYS:HB3  | 8        | 0.11          |
| (1,621) | 1:700:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:H    | 2        | 0.11          |
| (1,616) | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HA   | 13       | 0.11          |
| (1,616) | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HA   | 14       | 0.11          |
| (1,616) | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HA   | 15       | 0.11          |
| (1,616) | 1:644:A:ALA:H    | 1:644:A:ALA:HA   | 17       | 0.11          |
| (1,528) | 1:637:A:ALA:HB1  | 1:635:A:LEU:HA   | 17       | 0.11          |
| (1,486) | 1:698:A:GLU:HG3  | 1:701:A:MET:HE1  | 17       | 0.11          |
| (1,480) | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:627:A:SER:HA   | 17       | 0.11          |
| (1,469) | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB2  | 9        | 0.11          |
| (1,469) | 1:721:A:ALA:HA   | 1:644:A:ALA:HB1  | 16       | 0.11          |
| (1,299) | 1:694:A:THR:HG23 | 1:716:A:ALA:HB2  | 2        | 0.11          |
| (1,290) | 1:692:A:LEU:HD21 | 1:692:A:LEU:HB2  | 7        | 0.11          |
| (1,255) | 1:645:A:LEU:HD12 | 1:645:A:LEU:HA   | 14       | 0.11          |
| (1,255) | 1:645:A:LEU:HD11 | 1:645:A:LEU:HA   | 19       | 0.11          |
| (1,252) | 1:668:A:LEU:HD21 | 1:668:A:LEU:HG   | 18       | 0.11          |
| (1,186) | 1:711:A:GLN:HG2  | 1:707:A:ARG:HG2  | 16       | 0.11          |
| (1,104) | 1:628:A:PRO:HD2  | 1:655:A:GLU:HG2  | 10       | 0.11          |
| (3,209) | 1:640:A:TRP:HD1  | 1:638:A:LEU:HD11 | 13       | 0.1           |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB1  | 1:699:A:ALA:HA   | 4        | 0.1           |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:699:A:ALA:HA   | 6        | 0.1           |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:699:A:ALA:HA   | 7        | 0.1           |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:699:A:ALA:HA   | 9        | 0.1           |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB2  | 1:699:A:ALA:HA   | 11       | 0.1           |
| (3,175) | 1:700:A:ALA:HB3  | 1:699:A:ALA:HA   | 15       | 0.1           |
| (3,98)  | 1:669:A:ALA:HB3  | 1:672:A:ALA:HB2  | 11       | 0.1           |
| (3,95)  | 1:719:A:ALA:HB3  | 1:720:A:TRP:HD1  | 10       | 0.1           |
| (3,88)  | 1:703:A:ALA:HB3  | 1:704:A:MET:HB2  | 8        | 0.1           |
| (3,80)  | 1:708:A:LEU:HD11 | 1:705:A:LYS:HE2  | 10       | 0.1           |
| (3,75)  | 1:628:A:PRO:HG2  | 1:657:A:ASP:HB2  | 5        | 0.1           |
| (3,17)  | 1:712:A:TYR:HD2  | 1:712:A:TYR:HA   | 7        | 0.1           |
| (1,891) | 1:660:A:GLN:H    | 1:659:A:MET:H    | 7        | 0.1           |
| (1,866) | 1:666:A:MET:H    | 1:663:A:PRO:HB3  | 18       | 0.1           |
| (1,859) | 1:703:A:ALA:H    | 1:702:A:GLU:HB2  | 3        | 0.1           |
| (1,734) | 1:634:A:TRP:H    | 1:633:A:ASP:HB2  | 14       | 0.1           |
| (1,615) | 1:644:A:ALA:H    | 1:645:A:LEU:H    | 20       | 0.1           |
| (1,592) | 1:713:A:TYR:H    | 1:713:A:TYR:HB3  | 17       | 0.1           |
| (1,383) | 1:686:A:PRO:HG2  | 1:723:A:MET:HG3  | 19       | 0.1           |
| (1,305) | 1:703:A:ALA:HB1  | 1:665:A:TYR:HD2  | 20       | 0.1           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,274) | 1:682:A:LEU:HA   | 1:682:A:LEU:HD23 | 1        | 0.1           |
| (1,252) | 1:668:A:LEU:HD23 | 1:668:A:LEU:HG   | 14       | 0.1           |
| (1,133) | 1:675:A:LEU:HB2  | 1:692:A:LEU:HD21 | 17       | 0.1           |
| (1,87)  | 1:700:A:ALA:HA   | 1:709:A:ALA:HB1  | 7        | 0.1           |
| (1,87)  | 1:700:A:ALA:HA   | 1:709:A:ALA:HB1  | 16       | 0.1           |

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

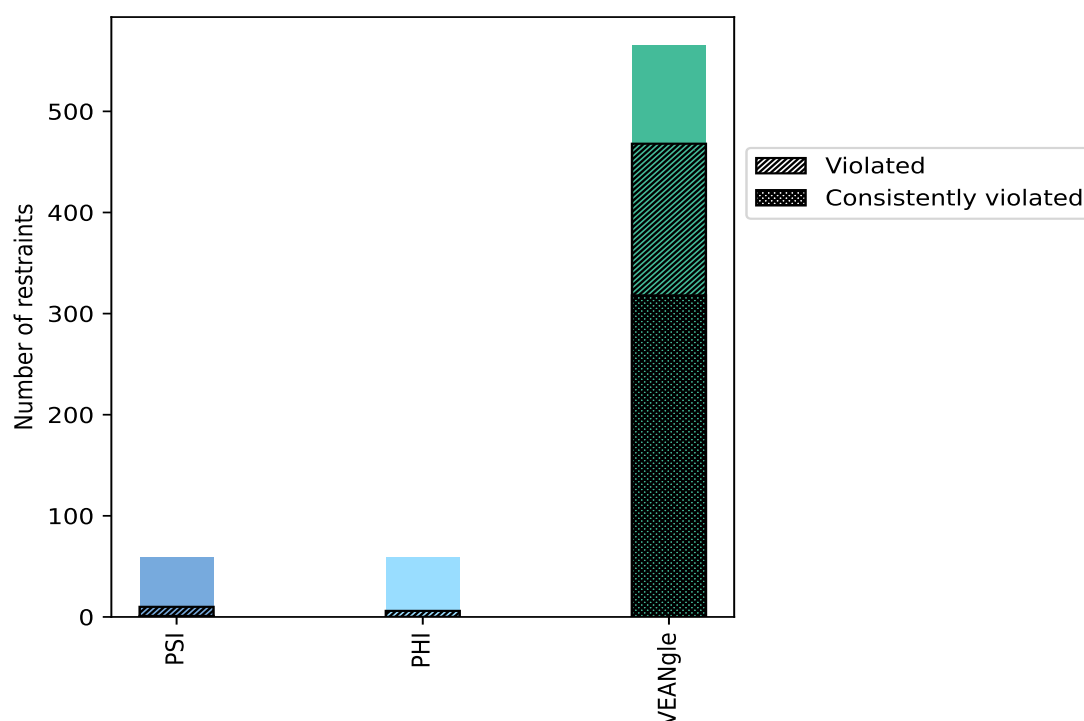
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

| Angle type | Count | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|            |       |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| PSI        | 59    | 8.6            | 10                    | 16.9           | 1.5            | 1                                  | 1.7            | 0.1            |
| PHI        | 59    | 8.6            | 6                     | 10.2           | 0.9            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| VEAngle    | 565   | 82.7           | 468                   | 82.8           | 68.5           | 318                                | 56.3           | 46.6           |
| Total      | 683   | 100.0          | 484                   | 70.9           | 70.9           | 319                                | 46.7           | 46.7           |

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> 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

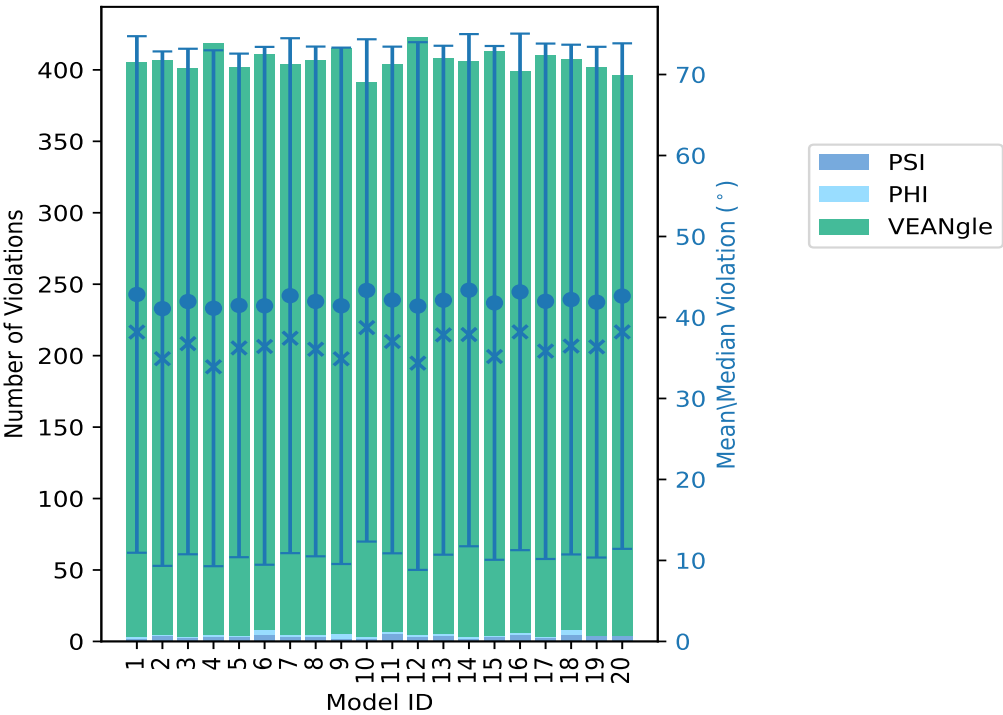
## 10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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 | VEANgle | Total |          |         |        |            |
| 1        | 2                    | 1   | 402     | 405   | 42.84    | 124.97  | 31.89  | 38.2       |
| 2        | 4                    | 1   | 402     | 407   | 41.09    | 118.67  | 31.76  | 34.91      |
| 3        | 3                    | 0   | 398     | 401   | 41.97    | 120.32  | 31.21  | 36.77      |
| 4        | 3                    | 2   | 414     | 419   | 41.14    | 121.83  | 31.85  | 33.91      |
| 5        | 3                    | 1   | 398     | 402   | 41.49    | 117.98  | 31.09  | 36.24      |
| 6        | 5                    | 3   | 403     | 411   | 41.44    | 123.12  | 31.97  | 36.42      |
| 7        | 3                    | 2   | 399     | 404   | 42.69    | 121.91  | 31.79  | 37.44      |
| 8        | 3                    | 2   | 402     | 407   | 41.98    | 125.54  | 31.47  | 36.08      |
| 9        | 2                    | 3   | 410     | 415   | 41.44    | 121.82  | 31.88  | 34.9       |
| 10       | 2                    | 1   | 388     | 391   | 43.34    | 121.27  | 31.01  | 38.75      |
| 11       | 5                    | 2   | 397     | 404   | 42.16    | 121.62  | 31.28  | 37.04      |
| 12       | 3                    | 2   | 418     | 423   | 41.41    | 120.13  | 32.58  | 34.36      |
| 13       | 4                    | 1   | 403     | 408   | 42.13    | 125.66  | 31.42  | 37.85      |
| 14       | 2                    | 1   | 403     | 406   | 43.37    | 125.2   | 31.62  | 37.89      |
| 15       | 3                    | 1   | 409     | 413   | 41.8     | 123.41  | 31.72  | 35.18      |
| 16       | 5                    | 1   | 393     | 399   | 43.16    | 123.61  | 31.89  | 38.22      |
| 17       | 3                    | 0   | 407     | 410   | 42.0     | 120.96  | 31.82  | 35.85      |
| 18       | 5                    | 3   | 399     | 407   | 42.21    | 119.85  | 31.47  | 36.47      |
| 19       | 4                    | 0   | 398     | 402   | 41.89    | 118.26  | 31.53  | 36.37      |
| 20       | 4                    | 0   | 392     | 396   | 42.64    | 119.53  | 31.21  | 38.22      |



10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model ⓘ



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 ⓘ

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 | VEAngle | Total | Count <sup>1</sup>       | %    |
| 2                             | 3   | 10      | 15    | 1                        | 5.0  |
| 1                             | 1   | 9       | 11    | 2                        | 10.0 |
| 0                             | 0   | 11      | 11    | 3                        | 15.0 |
| 2                             | 0   | 6       | 8     | 4                        | 20.0 |
| 1                             | 0   | 3       | 4     | 5                        | 25.0 |
| 1                             | 0   | 5       | 6     | 6                        | 30.0 |
| 0                             | 0   | 7       | 7     | 7                        | 35.0 |
| 0                             | 0   | 8       | 8     | 8                        | 40.0 |
| 1                             | 0   | 4       | 5     | 9                        | 45.0 |
| 0                             | 1   | 7       | 8     | 10                       | 50.0 |
| 0                             | 0   | 4       | 4     | 11                       | 55.0 |

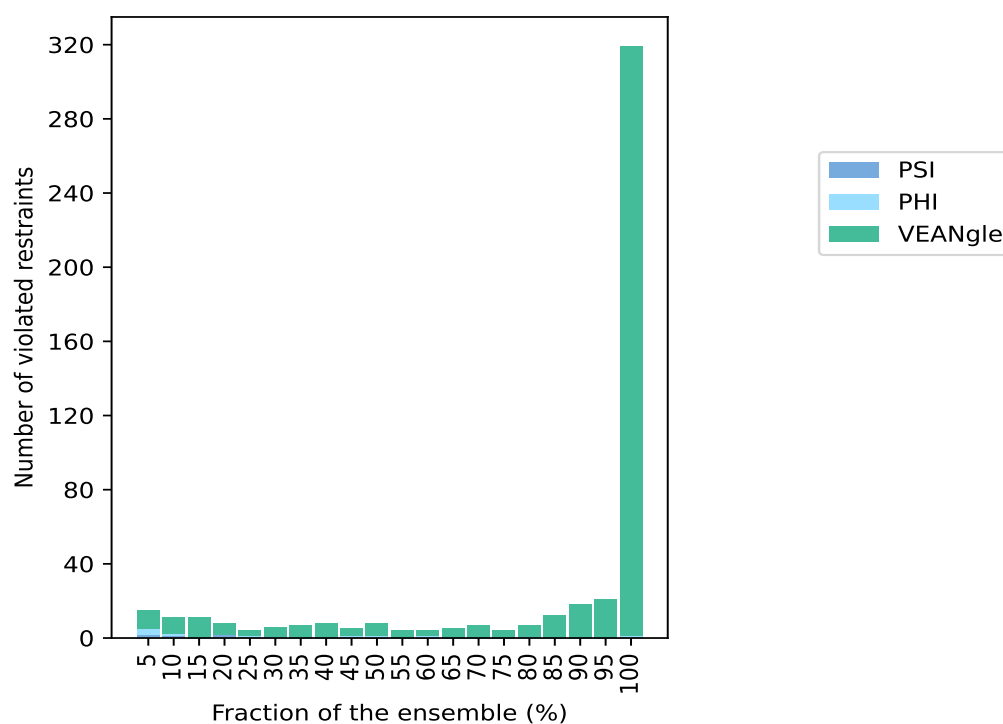
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints |     |         |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----|---------|-------|--------------------------|-------|
| PSI                           | PHI | VEANgle | Total | Count <sup>1</sup>       | %     |
| 0                             | 1   | 3       | 4     | 12                       | 60.0  |
| 0                             | 0   | 5       | 5     | 13                       | 65.0  |
| 0                             | 0   | 7       | 7     | 14                       | 70.0  |
| 0                             | 0   | 4       | 4     | 15                       | 75.0  |
| 1                             | 0   | 6       | 7     | 16                       | 80.0  |
| 0                             | 0   | 12      | 12    | 17                       | 85.0  |
| 0                             | 0   | 18      | 18    | 18                       | 90.0  |
| 0                             | 0   | 21      | 21    | 19                       | 95.0  |
| 1                             | 0   | 318     | 319   | 20                       | 100.0 |

<sup>1</sup> Number of models with violations

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

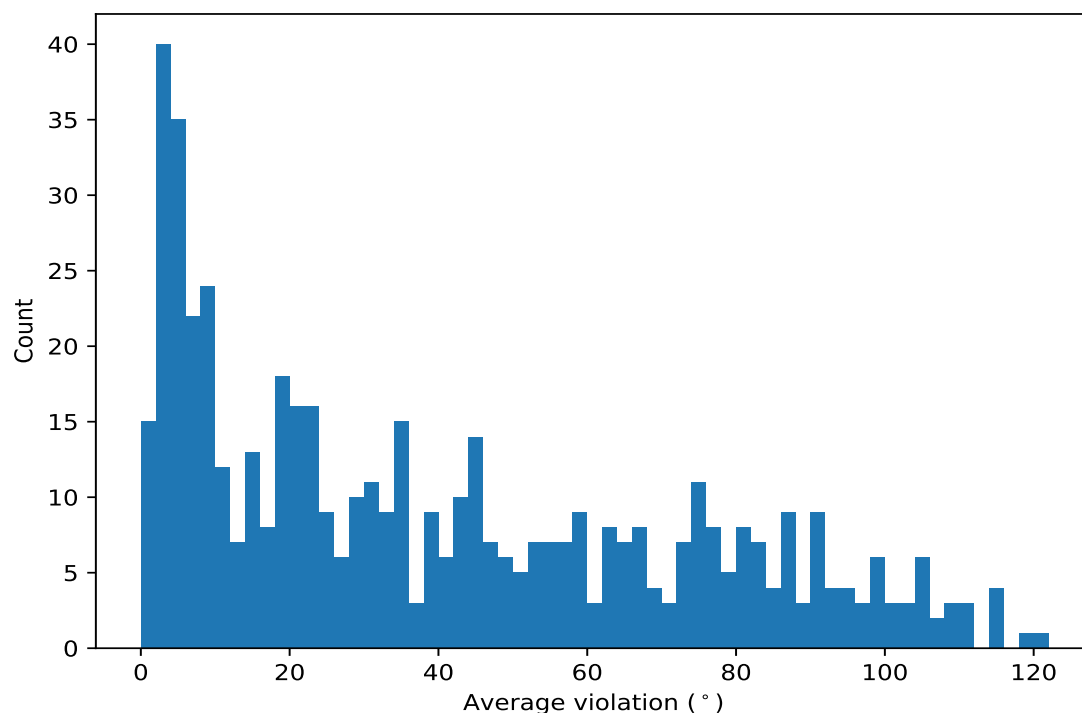


## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

### 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 ⓘ

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 <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 120.4  | 3.5             | 120.44 |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 119.54 | 1.72            | 119.31 |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20                  | 114.4  | 4.93            | 114.8  |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20                  | 114.4  | 4.93            | 114.8  |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 114.0  | 3.93            | 112.45 |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 114.0  | 3.93            | 112.45 |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 111.03 | 2.91            | 111.5  |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20                  | 110.23 | 3.57            | 111.74 |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20                  | 110.23 | 3.57            | 111.74 |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 20                  | 109.99 | 3.92            | 109.74 |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 20                  | 109.99 | 3.92            | 109.74 |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 108.76 | 5.57            | 109.45 |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 107.87 | 5.02            | 107.82 |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 107.87 | 5.02            | 107.82 |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20                  | 105.34 | 2.77            | 105.34 |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 105.03 | 3.98            | 103.86 |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 104.59 | 10.27           | 108.7  |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 104.59 | 10.27           | 108.7  |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20                  | 104.06 | 3.79            | 105.32 |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20                  | 104.06 | 3.79            | 105.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 20                  | 102.3  | 3.96            | 101.02 |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 102.02 | 4.19            | 101.19 |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 102.02 | 4.19            | 101.19 |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 101.44 | 5.86            | 101.74 |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 101.26 | 4.34            | 101.82 |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 100.24 | 3.46            | 100.16 |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 20                  | 98.65  | 1.98            | 98.48  |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 98.54  | 5.45            | 99.11  |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 98.54  | 5.45            | 99.11  |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20                  | 98.27  | 4.45            | 99.12  |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20                  | 98.27  | 4.45            | 99.12  |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 98.05  | 3.95            | 97.68  |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 96.94  | 5.73            | 97.99  |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 96.31  | 7.48            | 93.69  |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 96.31  | 7.48            | 93.69  |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 20                  | 95.4   | 1.39            | 95.68  |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 95.26  | 10.57           | 95.5   |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 95.26  | 10.57           | 95.5   |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 95.16  | 5.1             | 94.71  |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 93.05  | 6.6             | 93.52  |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 92.28  | 2.08            | 92.37  |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 91.47  | 3.7             | 91.22  |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 91.43  | 10.1            | 94.77  |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 91.43  | 10.1            | 94.77  |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 91.08  | 2.58            | 91.14  |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 91.08  | 2.58            | 91.14  |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 91.07  | 15.24           | 96.58  |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 91.07  | 15.24           | 96.58  |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 20                  | 90.99  | 2.38            | 90.65  |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 20                  | 90.44  | 2.37            | 90.3   |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 89.78  | 3.97            | 89.68  |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 88.77  | 3.47            | 87.95  |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 88.11  | 6.92            | 88.32  |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 87.91  | 10.0            | 87.51  |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 87.72  | 10.27           | 85.77  |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 87.7   | 3.07            | 87.39  |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 87.61  | 9.57            | 85.87  |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 87.28  | 5.21            | 89.83  |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 87.28  | 5.21            | 89.83  |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 86.7   | 6.88            | 86.22  |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 86.7   | 6.88            | 86.22  |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 86.2   | 0.94            | 86.27  |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 85.92  | 8.38            | 86.68  |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 85.43  | 4.47            | 85.47  |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 85.09  | 5.82            | 86.71  |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 84.12  | 6.36            | 83.54  |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 83.92  | 7.67            | 86.44  |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 83.92  | 7.67            | 86.44  |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 83.76  | 3.84            | 83.26  |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 82.53  | 8.82            | 83.52  |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 82.43  | 1.52            | 82.06  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 81.6  | 8.73            | 82.01  |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 81.58 | 1.39            | 81.44  |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 81.34 | 7.83            | 82.4   |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 81.04 | 3.44            | 81.48  |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 80.64 | 12.7            | 81.76  |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 80.64 | 12.7            | 81.76  |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 80.47 | 1.89            | 80.64  |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 80.24 | 9.45            | 80.98  |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 79.75 | 26.24           | 88.36  |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 79.75 | 26.24           | 88.36  |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 79.64 | 13.91           | 80.37  |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 79.64 | 13.91           | 80.37  |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20                  | 78.39 | 2.11            | 78.94  |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 77.93 | 3.11            | 77.0   |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 77.62 | 8.26            | 79.19  |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 77.58 | 8.37            | 76.76  |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 76.6  | 8.71            | 76.56  |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20                  | 76.52 | 1.82            | 76.29  |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 76.52 | 4.31            | 77.63  |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 76.05 | 10.72           | 77.68  |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 76.05 | 10.72           | 77.68  |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 75.86 | 3.98            | 74.99  |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 75.19 | 6.37            | 74.68  |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 74.85 | 3.28            | 75.18  |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 74.69 | 1.24            | 74.83  |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 20                  | 74.4  | 16.74           | 73.69  |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 74.23 | 1.69            | 74.76  |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 74.2  | 3.19            | 73.74  |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20                  | 74.17 | 7.31            | 72.32  |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 74.15 | 7.8             | 71.61  |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 74.15 | 7.8             | 71.61  |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 74.13 | 3.38            | 74.71  |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 73.65 | 3.95            | 74.69  |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 73.28 | 13.95           | 73.42  |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 73.28 | 12.88           | 75.1   |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 73.28 | 12.88           | 75.1   |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 72.45 | 5.48            | 72.68  |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20                  | 72.15 | 3.68            | 71.81  |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 72.0  | 3.29            | 72.76  |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 71.11 | 2.45            | 70.99  |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 70.86 | 1.6             | 70.66  |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 70.13 | 3.55            | 70.15  |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20                  | 68.41 | 2.24            | 68.56  |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 68.26 | 6.59            | 68.63  |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 68.2  | 21.62           | 74.4   |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 68.2  | 21.62           | 74.4   |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 67.85 | 2.92            | 67.3   |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 67.79 | 8.68            | 66.44  |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 67.37 | 6.02            | 67.48  |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 67.15 | 8.7             | 65.02  |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 66.86 | 16.36           | 69.48  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 66.86 | 16.36           | 69.48  |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 66.84 | 5.92            | 68.1   |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 66.06 | 7.19            | 63.58  |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 65.83 | 2.59            | 65.92  |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 65.5  | 14.49           | 68.06  |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 65.02 | 8.56            | 64.32  |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 64.98 | 4.19            | 64.51  |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 64.66 | 2.9             | 64.36  |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 64.6  | 12.86           | 64.44  |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 64.24 | 1.42            | 63.99  |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20                  | 63.92 | 0.73            | 63.87  |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 63.61 | 2.87            | 63.26  |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 63.4  | 6.57            | 64.59  |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20                  | 63.17 | 1.77            | 62.93  |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 63.04 | 3.21            | 62.83  |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 62.57 | 1.28            | 62.48  |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 62.45 | 5.8             | 61.24  |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 62.23 | 7.59            | 62.64  |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 60.68 | 1.92            | 60.74  |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 60.03 | 7.01            | 58.32  |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 60.02 | 3.23            | 59.71  |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 59.21 | 1.33            | 59.04  |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 59.15 | 13.19           | 58.78  |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 59.15 | 13.19           | 58.78  |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 58.99 | 2.18            | 58.7   |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 58.85 | 3.29            | 59.25  |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 58.72 | 2.43            | 59.09  |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 58.38 | 3.29            | 58.23  |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 58.26 | 2.31            | 57.72  |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 58.11 | 6.13            | 58.24  |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 57.93 | 8.14            | 57.9   |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 57.63 | 2.31            | 57.42  |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 57.18 | 5.96            | 57.54  |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 56.63 | 1.86            | 56.36  |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 56.32 | 1.19            | 56.04  |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 56.23 | 2.54            | 56.18  |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 56.05 | 0.83            | 55.98  |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 55.77 | 2.48            | 55.54  |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 55.41 | 3.6             | 56.03  |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 20                  | 54.84 | 2.06            | 55.18  |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 54.81 | 7.31            | 54.36  |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 54.51 | 0.94            | 54.56  |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20                  | 54.28 | 5.49            | 55.11  |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 54.1  | 4.71            | 52.87  |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 53.86 | 1.78            | 53.52  |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 53.61 | 8.99            | 52.36  |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 53.6  | 1.2             | 53.74  |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 53.09 | 1.54            | 52.8   |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 52.33 | 7.34            | 51.24  |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 52.3  | 1.63            | 51.78  |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 52.18 | 16.59           | 50.58  |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 20                  | 51.26 | 3.29            | 50.83  |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 51.0  | 22.88           | 48.65  |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 50.49 | 4.12            | 51.1   |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 50.31 | 1.09            | 50.15  |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 50.23 | 4.4             | 49.98  |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 49.76 | 7.11            | 48.32  |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 49.47 | 1.44            | 49.44  |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 49.36 | 3.99            | 50.18  |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 48.5  | 6.24            | 49.33  |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 48.13 | 3.67            | 48.0   |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 48.06 | 4.48            | 49.53  |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 47.94 | 2.08            | 47.88  |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 47.39 | 2.76            | 46.9   |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 47.33 | 1.08            | 47.17  |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 46.81 | 2.34            | 46.4   |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 20                  | 46.54 | 3.84            | 44.92  |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 46.15 | 4.07            | 45.98  |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 46.02 | 3.29            | 45.72  |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 45.69 | 4.43            | 46.74  |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 45.54 | 6.39            | 45.02  |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 45.3  | 13.05           | 49.77  |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 45.3  | 13.05           | 49.77  |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 45.23 | 1.41            | 45.08  |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 45.23 | 2.63            | 45.4   |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 45.07 | 14.44           | 42.51  |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 44.81 | 7.18            | 46.33  |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 44.57 | 3.48            | 43.92  |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 44.55 | 3.63            | 45.12  |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 43.98 | 13.84           | 43.4   |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 43.98 | 13.84           | 43.4   |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 20                  | 43.77 | 3.27            | 43.74  |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 43.67 | 19.41           | 42.5   |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20                  | 43.56 | 1.18            | 43.75  |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 43.27 | 3.35            | 42.42  |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 43.25 | 8.29            | 43.11  |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 42.92 | 4.94            | 43.57  |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 41.53 | 1.41            | 41.2   |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 40.78 | 1.59            | 40.26  |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 40.6  | 2.64            | 40.48  |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20                  | 40.55 | 1.83            | 40.18  |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20                  | 40.07 | 7.35            | 40.94  |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 40.06 | 2.56            | 39.58  |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 39.83 | 3.24            | 39.24  |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 39.73 | 2.65            | 39.49  |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 39.72 | 2.57            | 39.97  |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 39.61 | 8.09            | 41.62  |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 39.51 | 4.58            | 38.84  |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 20                  | 38.47 | 1.18            | 38.24  |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 38.32 | 5.73            | 38.61  |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 38.24 | 2.21            | 37.7   |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 38.04 | 7.49            | 38.4   |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 36.69 | 3.83            | 36.48  |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 36.53 | 1.93            | 36.89  |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 36.09 | 2.39            | 36.16  |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 35.61 | 1.81            | 35.48  |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 35.09 | 0.9             | 34.92  |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20                  | 34.96 | 1.65            | 34.91  |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 34.72 | 3.2             | 34.5   |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 34.69 | 0.83            | 34.72  |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 34.54 | 0.84            | 34.36  |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 34.52 | 4.8             | 32.57  |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 34.32 | 2.99            | 33.98  |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 34.29 | 4.78            | 35.33  |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 34.19 | 6.75            | 33.43  |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 34.15 | 15.1            | 30.92  |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 34.15 | 15.1            | 30.92  |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 33.18 | 0.73            | 33.18  |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 32.52 | 4.31            | 31.82  |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 32.4  | 2.49            | 32.87  |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 32.22 | 2.45            | 32.15  |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20                  | 32.18 | 4.29            | 31.97  |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 31.78 | 3.41            | 32.12  |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 31.78 | 3.41            | 32.12  |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 31.71 | 8.8             | 34.66  |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 31.71 | 8.8             | 34.66  |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 31.55 | 4.15            | 32.16  |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 30.82 | 6.47            | 30.77  |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 30.64 | 6.7             | 29.48  |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 30.54 | 11.3            | 28.28  |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 30.39 | 5.64            | 31.56  |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 30.33 | 9.86            | 28.58  |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 30.03 | 3.79            | 29.95  |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 20                  | 29.98 | 3.49            | 29.1   |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 29.93 | 3.67            | 29.31  |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 29.82 | 7.19            | 31.46  |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 29.31 | 2.04            | 29.46  |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 28.49 | 3.12            | 27.82  |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 28.46 | 3.03            | 28.72  |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 28.18 | 3.43            | 27.92  |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 28.06 | 13.24           | 27.72  |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 20                  | 27.87 | 4.01            | 28.0   |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 27.7  | 2.44            | 27.52  |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 27.67 | 3.5             | 27.92  |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 27.18 | 1.99            | 27.1   |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20                  | 27.09 | 1.96            | 27.08  |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 25.95 | 5.17            | 27.22  |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 25.53 | 2.4             | 25.06  |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 25.52 | 6.73            | 25.3   |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 24.51 | 2.61            | 23.46  |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 24.26 | 3.99            | 25.8   |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 24.21 | 2.6             | 23.32  |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 23.98 | 1.45            | 23.88  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20                  | 23.57 | 7.92            | 20.34  |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 23.57 | 4.68            | 23.4   |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 23.29 | 7.12            | 22.75  |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 23.04 | 1.25            | 22.97  |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 22.83 | 1.55            | 22.94  |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 22.46 | 6.63            | 20.57  |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20                  | 22.42 | 1.95            | 22.36  |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 22.36 | 7.38            | 22.13  |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20                  | 22.3  | 2.64            | 22.6   |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 21.99 | 7.34            | 23.65  |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 21.99 | 6.21            | 23.09  |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 21.99 | 6.21            | 23.09  |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 21.89 | 5.71            | 21.44  |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 21.81 | 1.44            | 22.11  |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20                  | 21.32 | 4.32            | 20.16  |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20                  | 21.27 | 6.31            | 20.49  |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 21.19 | 0.87            | 21.12  |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 20.98 | 3.89            | 20.63  |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 20.98 | 3.89            | 20.63  |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 20.72 | 5.14            | 20.9   |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 20.18 | 2.33            | 19.76  |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 19.95 | 0.78            | 19.93  |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 19.91 | 2.99            | 19.92  |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 20                  | 19.65 | 3.11            | 19.5   |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 19.42 | 3.38            | 20.4   |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 19.29 | 4.06            | 19.99  |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 19.22 | 2.86            | 18.46  |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 19.02 | 6.17            | 18.58  |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 18.14 | 2.95            | 17.9   |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 18.07 | 4.43            | 16.17  |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 15.88 | 3.78            | 16.02  |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 15.75 | 1.29            | 15.83  |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20                  | 15.41 | 5.43            | 17.21  |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 14.84 | 2.38            | 14.22  |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 14.82 | 0.94            | 14.7   |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 14.63 | 1.19            | 14.56  |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 13.16 | 3.97            | 13.06  |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 13.01 | 4.05            | 11.93  |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20                  | 12.56 | 5.13            | 11.84  |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 12.19 | 1.94            | 12.4   |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 12.09 | 3.12            | 13.24  |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 12.09 | 3.12            | 13.24  |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20                  | 11.66 | 3.3             | 11.62  |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 11.46 | 2.45            | 11.64  |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 11.41 | 1.64            | 11.56  |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 11.36 | 2.91            | 11.12  |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 11.36 | 2.34            | 12.1   |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20                  | 11.23 | 3.27            | 10.75  |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 11.1  | 3.63            | 11.46  |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20                  | 10.32 | 5.32            | 8.72   |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 10.04 | 1.7             | 10.24  |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 9.48  | 2.16            | 10.01  |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 9.36  | 3.22            | 8.73   |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20                  | 9.29  | 3.81            | 8.9    |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 9.04  | 2.42            | 9.04   |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20                  | 8.78  | 2.86            | 8.5    |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20                  | 8.77  | 0.79            | 8.67   |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20                  | 8.76  | 3.02            | 8.34   |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20                  | 8.7   | 1.64            | 9.0    |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20                  | 8.42  | 3.15            | 8.26   |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20                  | 7.95  | 2.44            | 7.88   |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 7.68  | 2.67            | 7.32   |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20                  | 7.39  | 1.98            | 7.24   |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 6.58  | 1.22            | 6.46   |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 6.31  | 1.58            | 6.28   |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 6.23  | 1.15            | 6.34   |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20                  | 5.76  | 1.74            | 5.64   |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 5.74  | 1.53            | 5.97   |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 5.65  | 1.25            | 5.36   |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20                  | 5.45  | 1.62            | 5.61   |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 5.3   | 1.78            | 4.92   |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20                  | 5.05  | 2.34            | 5.36   |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20                  | 4.87  | 1.66            | 4.72   |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20                  | 4.81  | 2.02            | 5.03   |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 20                  | 4.65  | 2.35            | 4.24   |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20                  | 4.55  | 2.14            | 4.7    |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 4.39  | 1.35            | 4.2    |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20                  | 4.27  | 1.97            | 3.99   |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20                  | 3.28  | 1.57            | 3.42   |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 19                  | 92.42 | 18.43           | 98.74  |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 19                  | 92.42 | 18.43           | 98.74  |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19                  | 35.33 | 8.43            | 39.04  |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19                  | 35.33 | 8.43            | 39.04  |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19                  | 25.94 | 10.36           | 27.38  |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19                  | 23.48 | 7.23            | 25.78  |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19                  | 22.83 | 6.32            | 25.55  |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19                  | 22.11 | 6.77            | 24.7   |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19                  | 22.11 | 6.77            | 24.7   |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19                  | 18.95 | 3.91            | 20.14  |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19                  | 18.95 | 3.91            | 20.14  |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19                  | 17.88 | 7.19            | 18.86  |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19                  | 17.69 | 10.3            | 14.27  |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19                  | 16.66 | 5.2             | 16.66  |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19                  | 15.85 | 4.97            | 15.97  |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19                  | 15.08 | 11.63           | 11.7   |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19                  | 13.76 | 3.09            | 13.85  |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 19                  | 9.77  | 3.0             | 9.47   |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19                  | 9.76  | 4.71            | 9.22   |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19                  | 8.75  | 3.64            | 10.22  |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19                  | 8.75  | 3.64            | 10.22  |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19                  | 5.99  | 2.24            | 5.81   |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19                  | 4.67  | 1.77            | 4.25   |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19                  | 4.26  | 2.17            | 4.65   |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19                  | 3.36  | 1.56            | 3.09   |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19                  | 1.92  | 0.52            | 1.9    |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18                  | 83.27 | 30.18           | 93.24  |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18                  | 83.27 | 30.18           | 93.24  |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18                  | 44.62 | 12.24           | 50.04  |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18                  | 44.62 | 12.24           | 50.04  |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 18                  | 35.31 | 19.22           | 35.16  |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18                  | 27.59 | 11.76           | 31.7   |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18                  | 20.42 | 10.64           | 18.26  |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18                  | 18.61 | 10.51           | 16.88  |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18                  | 15.39 | 9.28            | 14.76  |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 18                  | 14.79 | 8.26            | 12.5   |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18                  | 10.63 | 5.04            | 10.9   |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18                  | 8.07  | 4.93            | 8.34   |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 18                  | 6.4   | 2.53            | 5.96   |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18                  | 6.22  | 5.43            | 4.14   |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18                  | 6.14  | 3.3             | 5.75   |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18                  | 5.57  | 3.2             | 4.61   |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18                  | 5.42  | 1.82            | 5.46   |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18                  | 4.89  | 2.1             | 4.28   |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18                  | 2.38  | 0.79            | 2.3    |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18                  | 2.27  | 0.83            | 2.32   |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17                  | 44.63 | 26.1            | 34.45  |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17                  | 44.63 | 26.1            | 34.45  |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17                  | 33.34 | 24.93           | 25.13  |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17                  | 33.34 | 24.93           | 25.13  |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17                  | 28.52 | 17.82           | 30.41  |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17                  | 28.52 | 17.82           | 30.41  |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17                  | 25.33 | 11.46           | 27.04  |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 17                  | 24.95 | 19.71           | 23.68  |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17                  | 18.69 | 14.67           | 12.98  |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17                  | 14.4  | 8.73            | 12.82  |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 17                  | 14.12 | 8.12            | 14.13  |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17                  | 6.72  | 2.39            | 7.59   |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17                  | 3.33  | 1.05            | 3.41   |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17                  | 3.3   | 1.49            | 2.96   |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 17                  | 2.53  | 0.85            | 2.71   |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16                  | 16.96 | 13.2            | 10.92  |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16                  | 4.87  | 3.64            | 2.86   |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 16                  | 4.21  | 1.6             | 4.31   |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16                  | 3.86  | 1.71            | 3.41   |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16                  | 3.59  | 2.38            | 3.14   |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 16                  | 2.88  | 1.08            | 2.8    |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16                  | 1.94  | 0.93            | 1.57   |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15                  | 42.88 | 23.97           | 39.32  |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15                  | 42.88 | 23.97           | 39.32  |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15                  | 18.65 | 7.39            | 19.63  |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15                  | 15.91 | 9.19            | 16.36  |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15                  | 9.1   | 4.55            | 8.11   |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14                  | 8.34  | 4.2             | 8.72   |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 14                  | 8.34  | 4.2             | 8.72   |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 14                  | 7.92  | 3.28            | 8.48   |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 14                  | 6.88  | 4.12            | 5.93   |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 14                  | 5.62  | 5.04            | 3.91   |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 14                  | 4.87  | 2.1             | 4.53   |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 14                  | 4.59  | 1.94            | 4.58   |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 14                  | 3.02  | 1.36            | 2.7    |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:677:A:THR:N  | 1:677:A:THR:H | 13                  | 17.6  | 9.25            | 16.2   |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:677:A:THR:N  | 1:677:A:THR:H | 13                  | 17.6  | 9.25            | 16.2   |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 13                  | 9.63  | 4.15            | 11.15  |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 13                  | 9.63  | 4.15            | 11.15  |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 13                  | 5.19  | 2.69            | 5.08   |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 13                  | 2.45  | 0.76            | 2.52   |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 13                  | 2.26  | 0.69            | 2.3    |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 12                  | 11.63 | 10.22           | 10.64  |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 12                  | 11.63 | 10.22           | 10.64  |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 12                  | 6.19  | 5.57            | 3.5    |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 12                  | 5.38  | 2.49            | 5.3    |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 12                  | 3.13  | 1.72            | 2.5    |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 11                  | 32.09 | 27.02           | 21.93  |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 11                  | 32.09 | 27.02           | 21.93  |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 11                  | 5.44  | 2.67            | 4.64   |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 11                  | 4.75  | 2.57            | 4.3    |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 11                  | 2.09  | 0.69            | 2.0    |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 10                  | 17.0  | 10.71           | 12.4   |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 10                  | 8.89  | 1.58            | 8.38   |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 10                  | 3.97  | 1.52            | 3.82   |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 10                  | 3.64  | 1.8             | 3.93   |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 10                  | 3.3   | 1.21            | 2.93   |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 10                  | 3.22  | 1.12            | 3.42   |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 10                  | 2.99  | 1.1             | 2.91   |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 10                  | 1.8   | 0.73            | 1.59   |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:669:A:ALA:N  | 1:669:A:ALA:H | 9                   | 6.84  | 3.6             | 6.59   |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 9                   | 4.88  | 1.49            | 4.99   |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 9                   | 2.29  | 0.88            | 2.42   |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C  | 1:641:A:TYR:N | 9                   | 2.25  | 1.05            | 1.88   |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 9                   | 1.67  | 0.41            | 1.56   |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 8                   | 23.8  | 24.93           | 19.06  |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 8                   | 23.8  | 24.93           | 19.06  |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 8                   | 19.99 | 8.35            | 20.01  |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 8                   | 19.77 | 15.84           | 11.3   |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 8                   | 7.91  | 4.54            | 7.52   |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 8                   | 6.96  | 5.88            | 3.7    |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 8                   | 6.85  | 3.28            | 6.34   |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 8                   | 3.21  | 1.55            | 3.15   |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 8                   | 2.66  | 0.88            | 2.39   |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 7                   | 19.73 | 10.94           | 18.18  |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 7                   | 17.95 | 11.81           | 17.08  |
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 7                   | 9.83  | 6.97            | 7.64   |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 7                   | 8.05  | 6.31            | 5.41   |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 7                   | 3.26  | 1.15            | 3.2    |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

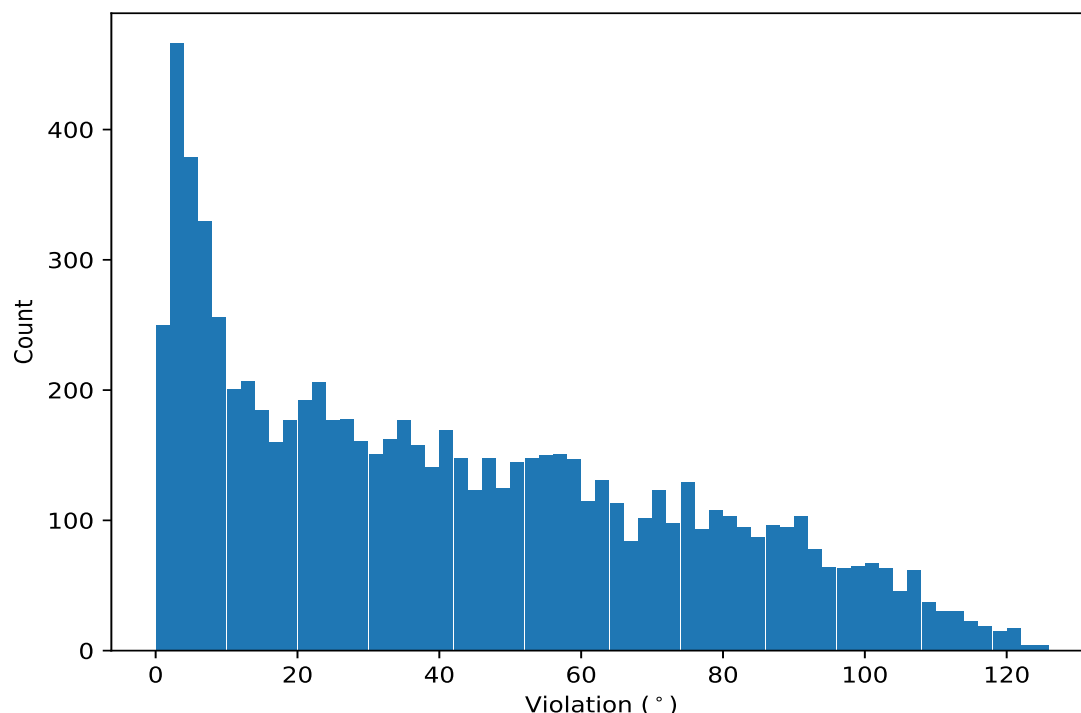
| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 7                   | 2.73  | 0.34            | 2.76   |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 7                   | 2.03  | 0.59            | 1.91   |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 6                   | 6.36  | 2.54            | 7.01   |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 6                   | 6.36  | 2.54            | 7.01   |
| (1,228) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 6                   | 5.89  | 2.3             | 5.66   |
| (1,233) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 6                   | 3.21  | 1.28            | 3.04   |
| (2,20)  | 1:662:A:GLU:N | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C  | 1:663:A:PRO:N | 6                   | 2.96  | 1.23            | 2.69   |
| (1,99)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 6                   | 2.62  | 0.5             | 2.6    |
| (1,493) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 6                   | 2.0   | 0.95            | 1.72   |
| (1,359) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:692:A:LEU:N  | 1:692:A:LEU:H | 5                   | 4.63  | 2.08            | 5.08   |
| (1,323) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 5                   | 3.1   | 1.98            | 2.0    |
| (1,163) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 5                   | 2.31  | 0.61            | 2.34   |
| (2,56)  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:CA | 1:687:A:GLN:C  | 1:688:A:ARG:N | 5                   | 1.29  | 0.11            | 1.3    |
| (1,543) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 4                   | 21.11 | 11.76           | 18.7   |
| (1,521) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 4                   | 3.54  | 1.5             | 3.18   |
| (1,539) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 4                   | 2.54  | 0.89            | 2.55   |
| (1,26)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 4                   | 1.8   | 0.76            | 1.45   |
| (1,178) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 4                   | 1.75  | 1.16            | 1.12   |
| (1,514) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 4                   | 1.62  | 0.32            | 1.78   |
| (2,14)  | 1:638:A:LEU:N | 1:638:A:LEU:CA | 1:638:A:LEU:C  | 1:639:A:HIS:N | 4                   | 1.46  | 0.36            | 1.48   |
| (2,2)   | 1:629:A:ASP:N | 1:629:A:ASP:CA | 1:629:A:ASP:C  | 1:630:A:ARG:N | 4                   | 1.4   | 0.37            | 1.28   |
| (1,405) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 3                   | 21.26 | 14.88           | 24.28  |
| (1,405) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 3                   | 21.26 | 14.88           | 24.28  |
| (1,218) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 3                   | 18.98 | 10.0            | 24.12  |
| (1,475) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 3                   | 8.54  | 4.55            | 10.18  |
| (1,371) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 3                   | 8.32  | 4.08            | 11.08  |
| (1,334) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 3                   | 6.54  | 6.2             | 3.22   |
| (1,431) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 3                   | 6.28  | 1.85            | 6.76   |
| (1,279) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 3                   | 5.38  | 1.7             | 6.32   |
| (1,437) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 3                   | 5.23  | 2.0             | 4.39   |
| (1,520) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 3                   | 3.34  | 0.78            | 2.85   |
| (1,98)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 3                   | 1.8   | 0.83            | 1.45   |
| (1,209) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 3                   | 1.24  | 0.12            | 1.26   |
| (1,468) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 2                   | 7.1   | 1.34            | 7.1    |
| (1,441) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 2                   | 5.64  | 3.16            | 5.64   |
| (1,312) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 2                   | 5.46  | 1.05            | 5.46   |
| (1,213) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 2                   | 5.26  | 3.05            | 5.26   |
| (1,555) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 2                   | 3.67  | 0.7             | 3.67   |
| (1,556) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 2                   | 3.18  | 1.8             | 3.18   |
| (2,6)   | 1:634:A:TRP:N | 1:634:A:TRP:CA | 1:634:A:TRP:C  | 1:635:A:LEU:N | 2                   | 2.32  | 0.1             | 2.32   |
| (1,558) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 2                   | 2.22  | 0.68            | 2.22   |
| (2,51)  | 1:681:A:GLY:C | 1:682:A:LEU:N  | 1:682:A:LEU:CA | 1:682:A:LEU:C | 2                   | 1.78  | 0.31            | 1.78   |
| (1,321) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 2                   | 1.7   | 0.45            | 1.7    |
| (1,146) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 2                   | 1.44  | 0.43            | 1.44   |

<sup>1</sup> Number of violated models, <sup>2</sup>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 (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 125.66        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 125.54        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 125.2         |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 124.97        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 123.61        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 123.41        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 123.12        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 14       | 122.11        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 121.91        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 121.83        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 121.82        |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 121.63        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 121.62        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 121.59        |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 4        | 121.36        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 10       | 121.27        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 121.06        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 121.03        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 120.96        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 120.57        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 120.32        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 17       | 120.19        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 120.13        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 120.05        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 120.04        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 119.85        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 119.67        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20       | 119.53        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 119.35        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 119.34        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 119.28        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 3        | 119.08        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 118.85        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 118.67        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 118.62        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 118.37        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 118.26        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 118.13        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 118.06        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 118.04        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 117.98        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 12       | 117.83        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 117.74        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 7        | 117.74        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 19       | 117.68        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 117.39        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 117.37        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 117.23        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 117.2         |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 117.17        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 16       | 117.05        |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 117.0         |
| (1,157) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 116.77        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 116.44        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 116.33        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 116.23        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 116.21        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 116.15        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 17       | 116.12        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 115.92        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 115.92        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 10       | 115.85        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 115.84        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 115.56        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 15       | 115.29        |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 8        | 115.19        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 18       | 114.94        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 114.81        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 114.75        |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 114.74        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1        | 114.74        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 114.66        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20       | 114.51        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 8        | 114.32        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 19       | 114.17        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 7        | 114.13        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 4        | 114.11        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 16       | 114.08        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 8        | 114.06        |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 12       | 114.04        |
| (1,169) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 114.0         |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 114.0         |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 113.95        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 113.94        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 113.82        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1        | 113.77        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 17       | 113.76        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 113.75        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 113.58        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 113.56        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 12       | 113.28        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 11       | 113.27        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 15       | 113.24        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 113.23        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 20       | 113.07        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 7        | 113.01        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1        | 112.9         |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 16       | 112.69        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 112.66        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 14       | 112.61        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 15       | 112.5         |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 8        | 112.47        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 18       | 112.47        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 112.46        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 112.44        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 112.3         |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 112.28        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 6        | 112.25        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20       | 112.1         |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 112.08        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 112.05        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 112.01        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 111.97        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 3        | 111.89        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 111.75        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 111.67        |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 111.52        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 111.47        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 111.38        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 2        | 111.38        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 111.33        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 16       | 111.31        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 111.07        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 111.05        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 111.05        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 111.01        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 5        | 110.96        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 110.95        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 10       | 110.88        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 110.75        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 110.68        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 110.64        |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 110.58        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 110.58        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 2        | 110.52        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 18       | 110.49        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 110.44        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 2        | 110.44        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 110.29        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 14       | 110.14        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 110.08        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 19       | 110.06        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 13       | 109.91        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 109.91        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 109.85        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 4        | 109.81        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 9        | 109.78        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 109.76        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 109.71        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 5        | 109.68        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 11       | 109.67        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 109.51        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 109.44        |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 109.38        |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 109.29        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 109.2         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 109.18        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 109.14        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 2        | 109.07        |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 109.02        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 12       | 108.99        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 16       | 108.97        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 108.89        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 18       | 108.83        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 6        | 108.8         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 108.76        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 108.74        |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 108.67        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 9        | 108.6         |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 6        | 108.58        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 11       | 108.5         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 108.43        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 5        | 108.36        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1        | 108.33        |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 2        | 108.25        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 108.19        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 9        | 108.16        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 108.15        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 19       | 108.11        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 107.91        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 107.74        |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 107.72        |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 107.69        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 107.64        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 107.63        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 107.61        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 9        | 107.58        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 15       | 107.56        |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 107.56        |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 107.52        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 107.51        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 9        | 107.5         |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 18       | 107.5         |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 8        | 107.49        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 107.48        |
| (1,144) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 107.48        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 107.46        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 9        | 107.46        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 13       | 107.37        |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 107.32        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 107.25        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 11       | 107.17        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 107.16        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 107.16        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 3        | 107.15        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 6        | 107.09        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 107.0         |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 5        | 106.89        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 106.86        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 3        | 106.86        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 11       | 106.86        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 6        | 106.82        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 106.79        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 106.79        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 106.76        |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 16       | 106.7         |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 16       | 106.66        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 10       | 106.66        |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 106.65        |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 106.64        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 106.57        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 5        | 106.57        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 7        | 106.53        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 106.5         |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 106.49        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 106.49        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20       | 106.47        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 106.45        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 7        | 106.38        |
| (1,168) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 106.37        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 106.35        |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 14       | 106.34        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 106.3         |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 106.28        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 17       | 106.2         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 106.18        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 106.17        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 106.13        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 3        | 106.12        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 106.08        |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 106.07        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 105.99        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 13       | 105.93        |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 105.77        |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 105.77        |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 105.72        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 8        | 105.67        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 4        | 105.65        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 19       | 105.65        |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 105.43        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 105.37        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 13       | 105.32        |
| (1,137) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 14       | 105.23        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 105.17        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 105.05        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 105.01        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20       | 105.01        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 15       | 105.0         |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 10       | 104.94        |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 104.89        |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 17       | 104.86        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 12       | 104.84        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 104.83        |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 104.82        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1        | 104.77        |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 104.7         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 104.6         |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 104.6         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 104.55        |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 3        | 104.53        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 13       | 104.42        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 104.38        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 104.38        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 104.37        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 104.34        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 14       | 104.33        |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 104.29        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 104.25        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 104.25        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 104.23        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 10       | 104.22        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 104.16        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 104.15        |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 18       | 104.1         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 19       | 104.09        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 15       | 104.08        |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 104.02        |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 4        | 103.91        |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 7        | 103.89        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 103.89        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 103.88        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 103.88        |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 7        | 103.83        |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 103.74        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 13       | 103.62        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 103.58        |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 103.52        |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 15       | 103.5         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 103.49        |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 103.49        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 103.47        |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 103.46        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 103.43        |
| (1,113) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 5        | 103.43        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 103.38        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 7        | 103.36        |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 103.33        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 103.27        |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 6        | 103.25        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 103.15        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 103.14        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 103.09        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 103.07        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 103.06        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 103.06        |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 103.04        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 103.03        |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 10       | 103.0         |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 4        | 103.0         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 102.97        |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 102.93        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 102.92        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 102.91        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 102.88        |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 102.87        |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 102.85        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 102.82        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 11       | 102.81        |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 12       | 102.7         |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 102.7         |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 8        | 102.69        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 102.69        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 102.68        |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 16       | 102.5         |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 102.5         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 102.47        |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 102.44        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 102.37        |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1        | 102.36        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 18       | 102.34        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 102.29        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 102.29        |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 4        | 102.28        |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20       | 102.28        |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 7        | 102.26        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 102.25        |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 12       | 102.21        |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 102.19        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 14       | 102.05        |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1        | 102.02        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 2        | 101.98        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 101.96        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 12       | 101.92        |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 101.91        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 101.91        |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 101.83        |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 19       | 101.77        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 101.71        |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 101.69        |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 101.63        |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 101.6         |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 101.51        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 101.47        |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 101.46        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 101.38        |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 101.37        |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 19       | 101.37        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 101.34        |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 101.33        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 17       | 101.29        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 101.2         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 9        | 101.19        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1        | 101.14        |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 101.13        |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 101.12        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 2        | 101.12        |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 101.07        |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 101.07        |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 101.02        |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 101.01        |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 17       | 101.01        |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 3        | 101.01        |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 14       | 101.01        |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 13       | 100.98        |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 100.98        |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 100.96        |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 100.92        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 12       | 100.91        |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 100.8         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 100.75        |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 100.75        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 100.71        |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 100.69        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 100.67        |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 100.65        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 4        | 100.63        |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 100.54        |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 100.54        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 100.53        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 100.53        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 100.5         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 5        | 100.47        |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 5        | 100.47        |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 100.46        |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 14       | 100.37        |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 100.36        |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 100.34        |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 100.34        |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 100.34        |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 100.34        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 5        | 100.29        |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 100.28        |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 100.27        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 100.24        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 100.21        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 3        | 100.19        |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 16       | 100.13        |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 99.9          |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 13       | 99.88         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 99.86         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 99.84         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 5        | 99.83         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 99.75         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 99.74         |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1        | 99.69         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 99.6          |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 99.55         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 18       | 99.52         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 99.52         |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 12       | 99.5          |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 8        | 99.46         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 99.43         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 99.43         |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 99.4          |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 16       | 99.39         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 99.39         |
| (1,124) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 13       | 99.24         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 99.21         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 7        | 99.18         |
| (1,155) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 10       | 99.16         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 17       | 99.13         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 11       | 99.04         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 98.99         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 6        | 98.96         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1        | 98.94         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 16       | 98.93         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 20       | 98.91         |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 98.89         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 98.89         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 98.77         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 98.75         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 2        | 98.74         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 12       | 98.72         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 98.7          |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 98.63         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 4        | 98.6          |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 98.6          |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 3        | 98.57         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 98.53         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 98.48         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 98.45         |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 98.41         |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 98.39         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 98.38         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 9        | 98.35         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 12       | 98.3          |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 17       | 98.27         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 98.26         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 98.25         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 19       | 98.23         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 14       | 98.21         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 98.2          |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 98.19         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 10       | 98.17         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 98.13         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 98.12         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 98.08         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 98.04         |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 2        | 98.04         |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 6        | 98.04         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 98.02         |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 18       | 98.01         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 97.99         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 97.98         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 15       | 97.96         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 97.93         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 97.92         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 2        | 97.86         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 97.84         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 97.78         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 18       | 97.77         |
| (1,182) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 97.75         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 97.73         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 97.69         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 97.59         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 8        | 97.56         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 97.52         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 97.48         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20       | 97.48         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 6        | 97.48         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 97.4          |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 97.4          |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 14       | 97.38         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 97.36         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 97.27         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 97.25         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 97.24         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 97.24         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 97.18         |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 97.17         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 97.14         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 97.14         |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 19       | 97.13         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 15       | 97.09         |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 15       | 97.05         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 11       | 96.99         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 96.93         |
| (1,160) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 20       | 96.93         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 96.89         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 96.85         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 96.79         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 7        | 96.79         |
| (1,295) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 11       | 96.75         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 96.75         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 96.68         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 96.67         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 96.67         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 13       | 96.61         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 13       | 96.61         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 96.6          |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 8        | 96.53         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 96.5          |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 96.48         |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 96.47         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 96.47         |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 96.46         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 96.38         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 16       | 96.32         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 96.29         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 96.19         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 96.18         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 96.16         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 96.13         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 96.1          |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 96.01         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 10       | 95.96         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 5        | 95.95         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 8        | 95.93         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 95.92         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 95.91         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 13       | 95.9          |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 6        | 95.84         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 15       | 95.79         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 95.79         |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 95.78         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 95.76         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 95.72         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 95.7          |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 17       | 95.68         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 95.65         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 95.58         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 12       | 95.56         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 17       | 95.54         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 2        | 95.51         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 95.47         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 95.43         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 15       | 95.4          |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 95.39         |
| (1,296) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 95.37         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 95.36         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 95.23         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 15       | 95.21         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 95.2          |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 95.12         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 94.99         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 94.98         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 94.97         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 18       | 94.95         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1        | 94.95         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 9        | 94.93         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 94.86         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 94.81         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 94.78         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 20       | 94.73         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 94.73         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 94.73         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 11       | 94.71         |
| (1,476) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 94.7          |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1        | 94.66         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 94.65         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 94.61         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 94.6          |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 94.53         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 94.48         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 11       | 94.45         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 94.45         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 94.42         |
| (1,190) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 11       | 94.36         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 94.35         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 94.32         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 94.31         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 16       | 94.28         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 94.28         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 18       | 94.26         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 94.22         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 94.16         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 3        | 94.15         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 94.1          |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 2        | 94.09         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 93.92         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 10       | 93.87         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 93.87         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 4        | 93.86         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 93.85         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 93.83         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 93.82         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 93.8          |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 93.79         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 93.77         |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 14       | 93.76         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 93.76         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 19       | 93.75         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 93.73         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 93.72         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 93.7          |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 19       | 93.68         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 93.62         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 93.61         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 93.58         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 93.53         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 93.51         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 93.47         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 93.46         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 93.45         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 18       | 93.42         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 8        | 93.35         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 93.3          |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 93.27         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 93.27         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 93.26         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 93.25         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 11       | 93.17         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 5        | 93.15         |
| (1,195) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 93.12         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 93.12         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 93.11         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 93.08         |
| (1,109) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 93.06         |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 92.99         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 92.97         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 92.94         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 92.93         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 92.92         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 92.89         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 2        | 92.82         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 7        | 92.81         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 11       | 92.79         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 92.75         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 16       | 92.73         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 92.73         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 3        | 92.72         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 92.72         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 8        | 92.66         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 92.66         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 92.66         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20       | 92.63         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 92.63         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 92.57         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 9        | 92.56         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 5        | 92.55         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 92.54         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 92.52         |
| (1,352) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 92.47         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 7        | 92.41         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 92.36         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 19       | 92.36         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 19       | 92.35         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 92.27         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 18       | 92.27         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 92.25         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 92.24         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 92.19         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 92.17         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 92.14         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 2        | 92.12         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 92.1          |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 92.09         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 91.99         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 14       | 91.94         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 91.94         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 16       | 91.9          |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 91.89         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 91.88         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 91.88         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 91.85         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 91.84         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 91.84         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 6        | 91.79         |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 91.77         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 91.77         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 91.76         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 91.73         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 15       | 91.68         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 91.64         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 91.54         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 91.52         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 91.52         |
| (1,196) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 17       | 91.45         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20       | 91.42         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 91.39         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 3        | 91.39         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 91.36         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 91.35         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 91.32         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 91.3          |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 18       | 91.26         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 91.26         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 14       | 91.25         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 91.24         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 91.21         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 8        | 91.18         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 13       | 91.15         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 91.13         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 91.06         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 7        | 91.03         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 91.02         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 91.01         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 6        | 90.99         |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 90.97         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 90.97         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 90.96         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 90.95         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 19       | 90.92         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 90.84         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 13       | 90.83         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 90.81         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 90.79         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 90.77         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 6        | 90.76         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 90.74         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 90.73         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 11       | 90.72         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 90.68         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 90.66         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 90.65         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 3        | 90.64         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 20       | 90.63         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 9        | 90.61         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 5        | 90.6          |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 90.6          |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 17       | 90.58         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 90.57         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 20       | 90.53         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 90.52         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 90.52         |
| (1,110) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 90.52         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 90.5          |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 90.49         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 4        | 90.48         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 90.46         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 90.45         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 90.43         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 90.42         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 3        | 90.41         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 90.41         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 90.4          |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 90.4          |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 9        | 90.39         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 90.39         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 90.37         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 90.37         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 90.37         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 90.35         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 90.34         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 90.33         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 11       | 90.32         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 13       | 90.3          |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 90.3          |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 3        | 90.28         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 90.24         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 9        | 90.22         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 16       | 90.22         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 90.17         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 90.14         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 90.11         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 90.08         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 90.08         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1        | 90.07         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 90.04         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 90.0          |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 7        | 89.97         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 89.96         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 89.94         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 15       | 89.93         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 89.9          |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 89.89         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 12       | 89.87         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 89.87         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 89.86         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 89.77         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 89.75         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 19       | 89.72         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 9        | 89.7          |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 89.69         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 89.67         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 89.67         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 89.67         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 89.66         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 89.65         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 3        | 89.63         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 89.59         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 89.59         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 3        | 89.57         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 89.54         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 15       | 89.51         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 89.49         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 89.49         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 89.46         |
| (1,143) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 14       | 89.41         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 89.41         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 4        | 89.39         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 89.37         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 89.33         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 89.32         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 89.28         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 10       | 89.28         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 89.25         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 89.23         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 89.19         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 89.18         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 17       | 89.16         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 4        | 89.15         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 89.11         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 89.09         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 89.05         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 89.04         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 89.03         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 89.02         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 89.02         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 89.02         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 88.93         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 88.91         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 88.89         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 88.8          |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 88.78         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 2        | 88.73         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 88.7          |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 88.67         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 88.6          |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 88.57         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 88.57         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 5        | 88.56         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 88.56         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 88.55         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 88.54         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 4        | 88.54         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 88.51         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 88.48         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 88.48         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 88.45         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 9        | 88.44         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 16       | 88.44         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 88.44         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 88.42         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 88.42         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 12       | 88.39         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 9        | 88.38         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 88.36         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 88.35         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 88.32         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 13       | 88.29         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 88.27         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 88.22         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 88.21         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 88.19         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 88.17         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 88.14         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 13       | 88.13         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 88.09         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 88.09         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 88.08         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 88.06         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 88.06         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 88.05         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 2        | 88.01         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 87.99         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 87.97         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 87.93         |
| (1,115) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 87.91         |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 9        | 87.89         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 87.89         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 87.89         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 87.86         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 87.86         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 87.84         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 87.82         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 87.78         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 6        | 87.76         |
| (1,480) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 10       | 87.74         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 87.73         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 87.72         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 87.71         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 87.71         |
| (1,167) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 20       | 87.63         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 87.62         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 87.62         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 87.54         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 12       | 87.51         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 87.51         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 87.51         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 87.48         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 87.46         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 87.45         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 87.44         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 10       | 87.44         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 87.44         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 4        | 87.43         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 87.32         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 87.31         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 87.28         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 87.22         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 87.21         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 87.19         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 87.16         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 87.14         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 87.13         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 87.12         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 87.1          |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 87.08         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 87.08         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 87.07         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 87.06         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 87.03         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 86.99         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 86.98         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 86.98         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 86.96         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 86.93         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 86.9          |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 86.89         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 86.85         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 86.84         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 86.79         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 86.76         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 86.76         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 86.75         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 86.75         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 86.68         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 86.66         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 86.65         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 86.63         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 86.62         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 86.6          |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 86.58         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 86.53         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 86.48         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 86.45         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 86.45         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 86.44         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 86.44         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 86.44         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 86.43         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 86.42         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 86.42         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 86.4          |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 86.39         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 86.39         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 86.35         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 86.35         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 86.31         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 86.23         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 86.13         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 86.12         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 86.06         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 86.05         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 86.04         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 86.04         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 86.03         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 86.03         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 86.01         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 86.0          |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 11       | 85.95         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 85.95         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 85.94         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 85.92         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 85.92         |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 85.89         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 85.89         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 85.87         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 85.86         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 85.85         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 85.82         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 85.82         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 85.77         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 85.72         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 85.65         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 85.64         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 85.61         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 85.61         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 85.6          |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 85.59         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 85.58         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 85.56         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 85.55         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 85.51         |
| (1,293) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 85.49         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 85.47         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 85.47         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 85.43         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 85.38         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 85.38         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 85.34         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 85.33         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 85.32         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 85.31         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 85.29         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 85.29         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 85.28         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 85.26         |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 85.23         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 85.21         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 85.21         |
| (1,203) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 12       | 85.2          |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 85.19         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 85.18         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 85.17         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 85.15         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 85.12         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 85.11         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 85.06         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 84.9          |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 84.89         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 84.87         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 84.87         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 5        | 84.77         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 84.75         |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 6        | 84.73         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 84.7          |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 84.69         |
| (1,68)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 84.65         |
| (1,328) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 84.64         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 84.62         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 84.59         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 84.58         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 84.49         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 84.47         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 84.4          |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 84.4          |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 84.39         |
| (1,442) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 84.37         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 84.3          |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 84.29         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 84.29         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 84.26         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 84.24         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 84.24         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 84.23         |
| (1,262) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 84.22         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 84.22         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 84.2          |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 84.19         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 84.12         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 84.09         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 84.03         |
| (1,204) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 84.02         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 84.01         |
| (1,119) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 18       | 84.0          |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 84.0          |
| (1,156) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 83.96         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 83.95         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 83.87         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 83.84         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 83.83         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 83.79         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 83.79         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 83.73         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 83.73         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 83.71         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 83.7          |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 83.69         |
| (1,56)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 83.69         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 83.67         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 83.65         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 83.65         |
| (1,92)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 83.59         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 83.49         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 83.49         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 83.46         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 83.45         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 83.43         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 83.41         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 83.39         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 83.38         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 83.38         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 83.36         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 83.3          |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 83.28         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 83.26         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 83.19         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 83.19         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 83.19         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 83.18         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 83.17         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 83.16         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 83.16         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 83.11         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 83.08         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 83.08         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 83.07         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 83.06         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 83.04         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 15       | 83.0          |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 82.98         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 82.97         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 82.89         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 82.87         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 82.84         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 82.82         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 82.78         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 82.77         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 82.74         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 82.73         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 82.69         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 82.69         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 82.65         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 6        | 82.65         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 82.6          |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 82.59         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 82.59         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 82.58         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 82.56         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 82.56         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 82.52         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 82.51         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 82.48         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 82.47         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 82.47         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 82.47         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 82.45         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 82.45         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 82.45         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 82.44         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 82.44         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 82.41         |
| (1,201) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 82.4          |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 82.37         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 82.34         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 82.33         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 8        | 82.33         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 82.32         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 82.32         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 82.31         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 82.25         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 17       | 82.22         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 82.19         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 82.19         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 82.13         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 82.12         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 82.11         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 82.1          |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 82.08         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 82.04         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 82.0          |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 81.94         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 81.92         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 81.91         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 81.84         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 81.83         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 81.8          |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 81.8          |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 81.8          |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 81.77         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 81.76         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 81.75         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 81.67         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 81.67         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 81.66         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 81.65         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 81.61         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 81.6          |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 81.55         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 81.55         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 81.54         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 81.52         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 81.52         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 81.52         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 81.51         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 81.48         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 81.48         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 81.47         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 81.46         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 81.43         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 81.42         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 81.4          |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 81.39         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 81.38         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 81.37         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 81.36         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 81.33         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 81.31         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 81.31         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 81.31         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 7        | 81.29         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 81.28         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 81.25         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 81.24         |
| (1,376) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 4        | 81.21         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 81.21         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 81.16         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 81.13         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 81.12         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 81.11         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 81.1          |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 81.1          |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 81.05         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 81.05         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 81.04         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 80.96         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 80.93         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 80.92         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 80.92         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 80.92         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 80.9          |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 80.87         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 80.86         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 80.85         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1        | 80.84         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 80.82         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 80.81         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 80.8          |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 80.76         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 80.7          |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 80.7          |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 80.63         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 80.58         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 80.57         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 80.57         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 80.51         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 80.51         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 80.45         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 80.45         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 80.39         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 80.39         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 80.38         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 80.38         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 80.33         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 80.31         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 80.3          |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 80.29         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 80.27         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 80.26         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 80.22         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 80.22         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1        | 80.21         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 80.16         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 80.14         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20       | 80.13         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 80.08         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 18       | 80.08         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 80.07         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 80.07         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 80.04         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 80.02         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 80.01         |
| (1,62)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 80.01         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 80.0          |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 79.99         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 79.96         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 79.95         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 79.91         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 79.89         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 79.88         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 79.88         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 79.84         |
| (1,194) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 79.84         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 79.84         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 79.82         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 79.81         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 79.8          |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 79.79         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 79.77         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 13       | 79.77         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 8        | 79.76         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 79.74         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 79.74         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 11       | 79.71         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 79.71         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 79.69         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 11       | 79.69         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 79.68         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 79.68         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 79.66         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 79.65         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 79.65         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 79.62         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 79.6          |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 10       | 79.55         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 79.53         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 79.53         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 79.5          |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 16       | 79.43         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 79.43         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 79.42         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 79.39         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 79.35         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 79.35         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 79.29         |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 79.28         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 79.23         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 79.23         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 79.19         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 14       | 79.18         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 79.17         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 79.16         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 79.16         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 15       | 79.13         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 79.1          |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 10       | 79.1          |
| (1,200) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 79.05         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 79.03         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 79.02         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 79.01         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 5        | 78.97         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 8        | 78.97         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 78.96         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 8        | 78.94         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 14       | 78.93         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 16       | 78.91         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 78.91         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 78.87         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 78.82         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 78.76         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 78.73         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 78.73         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 14       | 78.72         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 78.71         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 78.7          |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 78.7          |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 78.66         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 78.6          |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 78.56         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 78.54         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 78.53         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 78.53         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 78.44         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 78.41         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 78.41         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 78.38         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 12       | 78.36         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 78.35         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 78.35         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 78.33         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 78.33         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 78.29         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 4        | 78.25         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 78.24         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 78.24         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 78.21         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 78.2          |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 78.18         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 78.18         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 78.17         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1        | 78.16         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 9        | 78.12         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 78.11         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 78.11         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 4        | 78.09         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 78.08         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 3        | 78.06         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 78.05         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 78.03         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 78.02         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 78.01         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 14       | 78.0          |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 77.99         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 77.99         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1        | 77.99         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 77.99         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 77.99         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 5        | 77.89         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 77.87         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 77.85         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 77.84         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 77.79         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 77.74         |
| (1,79)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 77.72         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 19       | 77.71         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 77.7          |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 77.66         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 77.64         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 6        | 77.64         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 77.64         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 77.63         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 77.62         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 77.59         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 77.57         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 77.55         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 77.53         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 77.49         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 77.49         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 77.48         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 77.46         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 77.44         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 77.43         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 77.41         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 77.36         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 77.35         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 77.35         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 77.29         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 77.26         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 77.22         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 4        | 77.21         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 77.21         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 77.19         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 77.18         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 77.17         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 77.13         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 77.11         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 77.1          |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 77.07         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 77.02         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 77.0          |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 77.0          |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 76.99         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 76.98         |
| (1,243) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 76.98         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 10       | 76.98         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 76.98         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 76.86         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 13       | 76.84         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 76.81         |
| (1,165) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 76.81         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 76.76         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 76.74         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 76.7          |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 76.67         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 9        | 76.65         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 76.65         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 76.64         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 76.59         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 76.58         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 76.57         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 76.55         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 76.54         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 76.53         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 76.49         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 76.43         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 76.41         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 76.4          |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 76.4          |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 76.4          |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 76.36         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 4        | 76.36         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 76.26         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 76.26         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 7        | 76.25         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 76.22         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 3        | 76.22         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 76.21         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 76.19         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 20       | 76.18         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 76.17         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 76.17         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 76.17         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 76.11         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 19       | 76.08         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 6        | 76.05         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 75.99         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 75.98         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 14       | 75.91         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 75.91         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 75.9          |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 75.86         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 17       | 75.84         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 75.8          |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 75.77         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 7        | 75.74         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 75.73         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 75.71         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 75.71         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 7        | 75.69         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 75.68         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 17       | 75.68         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 75.67         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 75.66         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 11       | 75.63         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 75.62         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 75.62         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 75.61         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 75.61         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 75.59         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 75.57         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 75.55         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 75.54         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 75.54         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 75.53         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 75.52         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 75.5          |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 75.48         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 75.47         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 75.47         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 75.47         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 75.47         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 75.46         |
| (1,205) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 75.44         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 75.43         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 75.42         |
| (1,400) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 75.4          |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 75.36         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 12       | 75.36         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 75.33         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 75.32         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 75.31         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 7        | 75.31         |
| (1,135) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 75.3          |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 75.29         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 75.29         |
| (1,75)  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 75.27         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 75.25         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 75.24         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 14       | 75.2          |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 75.2          |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 75.18         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 15       | 75.18         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 75.16         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 75.14         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 15       | 75.13         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 75.13         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 75.11         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 6        | 75.1          |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 17       | 75.09         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 75.09         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 75.09         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 75.08         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 75.06         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 75.06         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 75.04         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 75.03         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 75.02         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 18       | 75.01         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 15       | 74.99         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 74.98         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 74.96         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 74.96         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 74.94         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 74.94         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 74.9          |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 74.9          |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 74.89         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 74.88         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 74.87         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 74.84         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 74.8          |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 74.79         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 74.78         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 74.76         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 74.73         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 74.72         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 74.7          |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 74.69         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 74.69         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 74.68         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 74.68         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 74.62         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 74.62         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 74.58         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 74.56         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 74.56         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 74.55         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 74.54         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 74.49         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 74.43         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 13       | 74.41         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 74.4          |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 74.38         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 74.36         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20       | 74.34         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 74.33         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 74.3          |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 74.27         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 74.27         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 74.26         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 74.24         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 74.24         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 74.23         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 74.22         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 19       | 74.22         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 74.19         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 74.17         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 74.11         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 74.1          |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 74.1          |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 74.1          |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 74.09         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 2        | 74.09         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 74.01         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 73.99         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 14       | 73.99         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 73.98         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 18       | 73.98         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 73.96         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 73.92         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 73.9          |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 73.85         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 73.81         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 73.81         |
| (1,78)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 73.81         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 17       | 73.79         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 73.79         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 73.77         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 73.74         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 73.73         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 19       | 73.72         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 73.71         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 73.69         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 73.67         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 73.66         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 12       | 73.62         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 73.61         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 73.6          |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 73.59         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 73.57         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 9        | 73.55         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 73.51         |
| (1,138) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 2        | 73.49         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 73.49         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 73.48         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 73.48         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 73.48         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 7        | 73.47         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 73.47         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 73.47         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 73.47         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 73.44         |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 2        | 73.43         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 73.42         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 73.42         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 73.37         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 73.33         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 73.33         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 73.3          |
| (1,95)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20       | 73.28         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 73.24         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 73.24         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 73.22         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 73.22         |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 73.22         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 73.2          |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 73.19         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 73.17         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 73.14         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20       | 73.13         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 73.12         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 11       | 73.11         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 73.09         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 73.08         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 73.05         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 73.05         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 73.0          |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 7        | 72.98         |
| (1,150) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 72.97         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 72.95         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 72.94         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 13       | 72.88         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 15       | 72.87         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 72.85         |
| (1,51)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 72.83         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 72.82         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1        | 72.76         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 72.75         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 72.71         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 6        | 72.66         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 72.65         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 4        | 72.64         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 72.64         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 72.63         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 14       | 72.58         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 72.51         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 19       | 72.48         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 72.47         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 72.47         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 72.47         |
| (1,164) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 72.45         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20       | 72.44         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 72.43         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 72.42         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 14       | 72.29         |
| (1,104) | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 72.27         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 72.23         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 72.22         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 14       | 72.14         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 72.14         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 72.13         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 72.01         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 16       | 71.92         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 71.92         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 71.87         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 71.86         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 71.75         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 71.75         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 71.74         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 71.74         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 71.73         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 71.7          |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 71.69         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 71.69         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 71.69         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 71.62         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 71.62         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 71.61         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 71.6          |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 71.59         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 71.58         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 71.57         |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 71.57         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 71.53         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 71.52         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 3        | 71.51         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 16       | 71.51         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 71.5          |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 5        | 71.48         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 6        | 71.45         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 71.45         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 71.44         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 71.42         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 15       | 71.41         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 6        | 71.41         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 71.38         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 71.38         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 71.36         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 71.35         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 71.34         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 71.34         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 71.34         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 71.33         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 71.33         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 71.31         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 71.29         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 71.28         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 71.26         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 71.24         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 71.18         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 71.17         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 10       | 71.14         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 71.13         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 71.11         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 71.11         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 71.1          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 71.03         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 71.02         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 71.01         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 71.0          |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 70.97         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 70.97         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 70.96         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 70.94         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 13       | 70.94         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 70.93         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 70.93         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 70.91         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 70.89         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 70.89         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 70.87         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 70.84         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 70.84         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 70.81         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 70.8          |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 70.8          |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 70.76         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 2        | 70.73         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 70.72         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 70.72         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 70.7          |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 10       | 70.68         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 15       | 70.67         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 70.63         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 70.63         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 70.62         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 70.61         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 70.6          |
| (1,139) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 70.59         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 12       | 70.55         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 70.52         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 70.5          |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 70.48         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 16       | 70.46         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 70.46         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1        | 70.45         |
| (1,266) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 70.45         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 70.45         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 70.43         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 70.43         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 70.42         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 70.42         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 70.42         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 70.38         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 70.38         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 70.37         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 70.31         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 70.25         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 70.2          |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 70.19         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 70.16         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 70.16         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 70.14         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 70.13         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 70.13         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 70.12         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 70.12         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 70.12         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 4        | 70.11         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 70.1          |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 70.04         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 9        | 70.04         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 70.03         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 18       | 70.01         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 2        | 70.0          |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 69.99         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 69.99         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 69.98         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 69.97         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 12       | 69.96         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 69.95         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 69.9          |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 69.89         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 69.88         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 69.85         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 69.85         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 69.83         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 3        | 69.79         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 69.75         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 69.74         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 69.73         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 6        | 69.73         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 69.7          |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 69.68         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 69.67         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 69.67         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1        | 69.65         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 69.65         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 69.62         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 69.62         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 69.6          |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 69.57         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 69.55         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 69.54         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 69.53         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 69.5          |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 69.47         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 69.47         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 69.45         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 69.36         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 69.33         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 69.3          |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 69.27         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 69.25         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 69.25         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 4        | 69.23         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 69.23         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 69.22         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 69.22         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 69.21         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 10       | 69.2          |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 69.2          |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 69.18         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 13       | 69.15         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 69.05         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 7        | 69.04         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 69.03         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 68.99         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 17       | 68.95         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 68.94         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 68.91         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 68.9          |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 68.88         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 68.87         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 68.87         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 68.87         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 18       | 68.86         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 68.86         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 68.84         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 11       | 68.82         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 68.77         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 68.73         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 2        | 68.69         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 68.68         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 68.68         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 8        | 68.67         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 68.64         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 4        | 68.62         |
| (1,257) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 68.6          |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 8        | 68.57         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 19       | 68.56         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 68.55         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 68.54         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 68.52         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 68.52         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 68.52         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 17       | 68.47         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 68.41         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 68.39         |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 68.38         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 68.34         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20       | 68.28         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 68.22         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 9        | 68.22         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 68.21         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 68.21         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 68.19         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 12       | 68.13         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 68.06         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 68.05         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 68.05         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 68.04         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 68.04         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 68.03         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 68.02         |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 68.02         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 68.02         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 67.91         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 67.91         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 67.91         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 67.9          |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 67.86         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 67.85         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 19       | 67.84         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 67.83         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 67.8          |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 67.78         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 67.74         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 67.71         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 67.7          |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 67.69         |
| (1,108) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 67.67         |
| (1,121) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 67.64         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 17       | 67.61         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 12       | 67.61         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 67.58         |
| (1,344) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 67.57         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 16       | 67.55         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 67.55         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 67.53         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 67.45         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 9        | 67.44         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 2        | 67.43         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 67.43         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 67.43         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 67.43         |
| (1,316) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 67.41         |
| (1,145) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 67.37         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 67.36         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 67.31         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 67.28         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 67.26         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 67.25         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 67.21         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 67.21         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 14       | 67.2          |
| (1,330) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 67.2          |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 67.14         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 67.1          |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 67.09         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 67.08         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 67.06         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 67.06         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 67.01         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1        | 67.01         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 66.97         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 66.95         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 66.93         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 66.92         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 8        | 66.9          |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 66.87         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 66.85         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 66.81         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 66.8          |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 66.73         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 66.72         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 8        | 66.69         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 66.65         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 66.63         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 66.55         |
| (1,434) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 3        | 66.49         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 66.47         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 66.44         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 66.4          |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 66.3          |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 66.25         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 66.25         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 66.23         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 2        | 66.22         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 66.18         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 66.16         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 9        | 66.13         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 66.11         |
| (1,481) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 66.1          |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 66.08         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 66.05         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 66.03         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 66.02         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 3        | 66.01         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 66.0          |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 66.0          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 65.99         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 3        | 65.98         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 65.97         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 65.96         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 65.95         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 65.94         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 65.94         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 65.91         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 65.89         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 16       | 65.87         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 65.86         |
| (1,91)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 65.84         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 65.83         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 65.82         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 65.8          |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 65.78         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 65.76         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 65.75         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 6        | 65.74         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 65.73         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 65.72         |
| (1,254) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 65.72         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 12       | 65.66         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 65.66         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 5        | 65.66         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 65.66         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 65.66         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 65.62         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 10       | 65.61         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 65.58         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 65.58         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 65.57         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20       | 65.55         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 65.48         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 65.45         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 65.45         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 65.45         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 65.42         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 65.41         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 65.39         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 65.38         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 65.36         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 65.35         |
| (1,341) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 65.29         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 65.28         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 3        | 65.28         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 2        | 65.21         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 65.19         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 11       | 65.16         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 65.14         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 65.09         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 65.09         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 65.09         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 65.09         |
| (1,281) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 18       | 65.06         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 7        | 65.06         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 65.05         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 65.0          |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 11       | 64.99         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 64.96         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 64.95         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 64.93         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 17       | 64.89         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 64.86         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 64.85         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 64.84         |
| (1,549) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 5        | 64.82         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 64.81         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 64.8          |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 64.79         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 64.77         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 9        | 64.72         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 16       | 64.71         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 10       | 64.65         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 64.64         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 64.6          |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 6        | 64.6          |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 64.55         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 64.54         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 14       | 64.47         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 64.45         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 64.44         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 64.4          |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 64.4          |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 18       | 64.37         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 64.36         |
| (1,524) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 64.35         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 64.34         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 14       | 64.32         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 64.31         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 64.31         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 64.31         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 64.3          |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 64.25         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20       | 64.22         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 8        | 64.22         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 12       | 64.22         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 64.21         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 64.19         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 64.15         |
| (1,93)  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 64.15         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 64.13         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1        | 64.11         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20       | 64.07         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 64.07         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 16       | 64.05         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 64.04         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 64.04         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 64.03         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 64.02         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 64.02         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 64.01         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 3        | 64.01         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 63.98         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 63.95         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 63.94         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 63.94         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 16       | 63.93         |
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 18       | 63.93         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 63.92         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 18       | 63.9          |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 63.9          |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 63.86         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 63.85         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 63.84         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 63.83         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 63.82         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 63.81         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 63.8          |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 63.79         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 63.76         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 63.76         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 63.76         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20       | 63.73         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 63.71         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 63.68         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 63.67         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 63.67         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 17       | 63.67         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 63.66         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 15       | 63.66         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 15       | 63.65         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 63.64         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 63.64         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 6        | 63.63         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 63.62         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 11       | 63.62         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 13       | 63.61         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 63.55         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 63.55         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 63.53         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 63.52         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 63.51         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 10       | 63.5          |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 63.47         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 63.45         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 63.45         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 63.44         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 63.44         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 63.42         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 63.41         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 63.41         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 63.38         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 19       | 63.38         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 63.36         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 63.33         |
| (1,222) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 63.32         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 63.31         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 63.22         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 63.22         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 63.2          |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 63.19         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 5        | 63.19         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 63.15         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 63.13         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 63.12         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 63.11         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 63.11         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 63.09         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 7        | 63.06         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 11       | 63.02         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 63.02         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 63.01         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 63.01         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 7        | 63.0          |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 62.99         |
| (1,246) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 62.98         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 62.96         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 62.95         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 19       | 62.95         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 62.94         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 62.91         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 10       | 62.91         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 62.88         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 4        | 62.87         |
| (1,67)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 62.87         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 62.85         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 5        | 62.85         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 62.84         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 12       | 62.84         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 62.83         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 19       | 62.82         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 62.81         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 62.8          |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,278) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 5        | 62.78         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 62.78         |
| (1,297) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 14       | 62.77         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 62.76         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 62.75         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 62.73         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 62.73         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 62.73         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 62.72         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 62.72         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 62.67         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 62.63         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 62.62         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 62.58         |
| (1,149) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 2        | 62.57         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 62.57         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 62.56         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 62.55         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 62.52         |
| (1,176) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 62.52         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 62.48         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 62.47         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 62.44         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 62.44         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 62.37         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 11       | 62.33         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 62.32         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 62.3          |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 62.25         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 62.25         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 62.25         |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 62.23         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 13       | 62.16         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 62.16         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 62.08         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 62.06         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 14       | 62.05         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 2        | 62.04         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 62.03         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 62.02         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 4        | 61.99         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 61.97         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 10       | 61.96         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 61.96         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 61.93         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 17       | 61.93         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 61.92         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 61.92         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 61.91         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 61.9          |
| (1,368) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 61.84         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 61.81         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 61.8          |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 9        | 61.8          |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 61.78         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1        | 61.78         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 61.77         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 61.77         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 61.75         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 61.75         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 61.72         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 61.69         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 61.69         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 61.68         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 61.65         |
| (1,285) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 61.65         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 61.61         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 61.58         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 61.57         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 61.52         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 61.51         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 61.51         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 61.51         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 61.47         |
| (1,265) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 61.46         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 61.45         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 61.45         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 61.45         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 13       | 61.44         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 61.43         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 61.42         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 61.41         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 18       | 61.37         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 61.35         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 61.35         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 61.34         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 61.33         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 61.28         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 61.26         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 61.21         |
| (1,63)  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 61.21         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 19       | 61.18         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 61.16         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 14       | 61.14         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 61.14         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 61.14         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 61.11         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 61.1          |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 61.09         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 61.08         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 61.08         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 61.07         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 61.07         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 60.96         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 60.9          |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 60.88         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 60.88         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 60.87         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 60.86         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 60.81         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 60.8          |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 60.8          |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 60.79         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 60.79         |
| (1,522) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 60.77         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 60.77         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 2        | 60.76         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 60.73         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 60.67         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 60.66         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 13       | 60.64         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 60.63         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 60.62         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 60.61         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 60.59         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 6        | 60.58         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 60.56         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 13       | 60.54         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 60.53         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 60.51         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 60.48         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 60.46         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 5        | 60.41         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 60.4          |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 60.37         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 60.36         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 60.36         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 60.34         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 60.34         |
| (1,307) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 3        | 60.33         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 60.31         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 60.3          |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 60.29         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 60.24         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 60.21         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 60.21         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 60.08         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 60.08         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 8        | 60.07         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 60.05         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 60.05         |
| (1,274) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 60.03         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 60.01         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 60.01         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 60.01         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 59.97         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 5        | 59.96         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 59.86         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 59.84         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 17       | 59.84         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 59.84         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 59.84         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 59.84         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 59.82         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 59.81         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 59.79         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 59.79         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 59.78         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 59.78         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 59.77         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 59.76         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 59.74         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 59.73         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 59.72         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 59.71         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 59.69         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 59.69         |
| (1,219) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 59.69         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 59.68         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 59.68         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 59.66         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 59.64         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 59.63         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 59.62         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 59.6          |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 59.56         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 59.55         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 59.54         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 59.54         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 59.54         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 59.54         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 59.53         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 59.53         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 59.53         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 59.53         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 59.51         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 59.5          |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 59.49         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 59.47         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 59.46         |
| (1,280) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 59.46         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 59.45         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 59.41         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 59.37         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 59.37         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 59.36         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 59.34         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 59.31         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 59.31         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 59.3          |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 59.28         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 59.24         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 59.22         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 59.2          |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 59.16         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 59.15         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 59.14         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 59.12         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 59.08         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 59.07         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 59.06         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 59.06         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 59.06         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 59.03         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 59.03         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 59.03         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 59.02         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 58.99         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 5        | 58.99         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 58.97         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 58.96         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 58.96         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 58.95         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 58.92         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 58.92         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 58.91         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 58.88         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 58.86         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 58.83         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 5        | 58.81         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 58.8          |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 58.78         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 58.77         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 58.75         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 58.74         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 58.73         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 58.72         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 9        | 58.71         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 58.71         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 58.69         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 58.69         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 58.67         |
| (1,494) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 58.62         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 58.62         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 58.6          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 58.59         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 58.55         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 58.54         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 58.54         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 58.52         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 58.51         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 58.51         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 8        | 58.5          |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 58.49         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 18       | 58.48         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 58.48         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 11       | 58.48         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 58.48         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 58.48         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 58.42         |
| (1,463) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 58.42         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 58.41         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 58.4          |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 58.39         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 58.36         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 58.32         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 58.31         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 58.29         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 58.29         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 58.27         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 58.24         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 58.24         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 18       | 58.21         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 58.21         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 58.21         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 58.18         |
| (1,502) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 58.17         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 58.17         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 58.17         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 58.16         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 58.15         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 58.15         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 58.12         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 58.1          |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 58.1          |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 58.08         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 58.08         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 58.04         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 58.03         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 58.02         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 58.01         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 58.0          |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 57.99         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 18       | 57.98         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 57.98         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 5        | 57.96         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 57.96         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 57.91         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 57.84         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 57.84         |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 57.84         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 57.83         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 57.81         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 57.8          |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 57.8          |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 57.79         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 57.79         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 15       | 57.76         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 57.75         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 57.75         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 57.72         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 57.72         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 57.71         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 57.68         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 57.68         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 57.67         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 57.63         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 57.59         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 57.58         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 57.56         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 57.56         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 57.53         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 57.52         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 14       | 57.52         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 57.51         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 57.5          |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 57.48         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 57.47         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 57.46         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 57.45         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 57.45         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 57.44         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 57.43         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 57.42         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 57.38         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 57.38         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 57.32         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 7        | 57.3          |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 57.3          |
| (1,74)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 57.3          |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 57.28         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 57.28         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 57.24         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 6        | 57.22         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 57.21         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 57.19         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 57.17         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 57.16         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 57.14         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 57.13         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 57.13         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 13       | 57.12         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 57.1          |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 57.1          |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 57.07         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1        | 57.05         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 57.02         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 57.02         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 57.02         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 57.01         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 57.0          |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 57.0          |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 57.0          |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 56.99         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 56.99         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 56.98         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 56.94         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 56.93         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 15       | 56.93         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 56.91         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 56.91         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 56.89         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 56.89         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 56.88         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 56.88         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 56.87         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 56.86         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 56.82         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 56.82         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 56.79         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 56.79         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 56.79         |
| (1,458) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 56.77         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 56.77         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 56.76         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 56.75         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 56.69         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 56.68         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 7        | 56.67         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 56.64         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 56.64         |
| (1,151) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 56.64         |
| (1,134) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 56.64         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 56.63         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 19       | 56.61         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 56.58         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 56.58         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 56.57         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 56.54         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 56.54         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 56.52         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 18       | 56.47         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 56.46         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 56.45         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 56.43         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 56.42         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 56.41         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 56.41         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 56.4          |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 56.39         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 56.38         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 56.37         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 56.35         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 56.35         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 56.34         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 56.32         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 56.32         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 56.28         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 56.28         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 15       | 56.26         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 56.24         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 56.22         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 2        | 56.21         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 56.21         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 56.21         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 56.19         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 56.19         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 56.19         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 56.18         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 56.18         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 56.18         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 56.17         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 56.17         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 56.16         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 56.15         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 56.13         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 56.11         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 56.1          |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 56.05         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 56.04         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 56.02         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 56.01         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 56.01         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 55.99         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 55.98         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 8        | 55.98         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 55.96         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 55.95         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 55.95         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 55.92         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 55.92         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 13       | 55.89         |
| (1,477) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 55.87         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 55.87         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 55.85         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 55.84         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 55.83         |
| (1,286) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 55.82         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 55.82         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 55.82         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 55.82         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 55.81         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 55.73         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 11       | 55.72         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 55.72         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 55.71         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 55.7          |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 10       | 55.68         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 55.68         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 55.65         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 55.65         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 6        | 55.64         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 55.64         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 55.63         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 55.63         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 55.55         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 55.54         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 8        | 55.53         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 55.52         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 55.52         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 55.49         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 16       | 55.48         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 55.47         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 55.46         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 55.46         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 55.45         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 55.45         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 55.44         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 7        | 55.42         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 55.41         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 55.41         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 55.41         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 55.4          |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 55.39         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 55.38         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 55.37         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 8        | 55.35         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 55.33         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 55.31         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 55.28         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 55.27         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 55.27         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 3        | 55.26         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1        | 55.25         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 2        | 55.23         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 55.22         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 55.2          |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 55.18         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 55.17         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 55.17         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 55.17         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 55.16         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 55.16         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 55.15         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 55.15         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 55.13         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 55.13         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 7        | 55.13         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 55.12         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20       | 55.08         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 55.06         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 55.05         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 55.04         |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 55.01         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 55.0          |
| (1,129) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 54.98         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20       | 54.97         |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 54.97         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 54.95         |
| (1,238) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 54.94         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20       | 54.94         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 54.93         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 54.92         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 54.9          |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 54.9          |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 54.88         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 54.88         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 2        | 54.88         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 54.85         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 54.85         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 54.83         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 54.83         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 13       | 54.83         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 54.8          |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 54.79         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 54.78         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 18       | 54.77         |
| (1,305) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 54.73         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 54.72         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 54.72         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 16       | 54.72         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 54.71         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 54.71         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 54.7          |
| (1,114) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 54.69         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 54.66         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 54.66         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 54.66         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 54.64         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 54.63         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 3        | 54.63         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 54.62         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 9        | 54.56         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 54.49         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 54.48         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 54.48         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 54.47         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 54.45         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 19       | 54.45         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 54.42         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 54.42         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 54.41         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 11       | 54.39         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 54.39         |
| (1,531) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 54.35         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 54.33         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 54.31         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 54.29         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 54.22         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 54.21         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 54.21         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 4        | 54.2          |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 54.18         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 11       | 54.16         |
| (1,29)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 54.15         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 8        | 54.12         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 54.1          |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 54.08         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 54.04         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 54.03         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 54.01         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 54.0          |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 54.0          |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 53.99         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 14       | 53.98         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 53.97         |
| (1,511) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 53.96         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 53.96         |
| (1,181) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 53.96         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 53.96         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 53.94         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 9        | 53.93         |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 53.92         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 53.91         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 53.9          |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 53.88         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 53.88         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 53.87         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 53.86         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 53.84         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 53.83         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 53.81         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 53.8          |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 53.78         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 53.77         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 5        | 53.76         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 14       | 53.73         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 53.73         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 4        | 53.71         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 53.7          |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 53.69         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 53.65         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 53.65         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 53.64         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 53.62         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 53.62         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 53.61         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 53.58         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 53.57         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 53.55         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 53.53         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 53.53         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 53.51         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 53.5          |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 53.49         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 53.47         |
| (1,380) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 53.46         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 53.46         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 53.43         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 53.38         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 53.36         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 53.33         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 53.33         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 53.32         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 53.31         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 53.3          |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 53.29         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 12       | 53.27         |
| (1,397) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 53.25         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 53.25         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 53.25         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 53.25         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 53.24         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 53.21         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 53.2          |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 20       | 53.18         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 16       | 53.17         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 53.17         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 53.17         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 53.16         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 5        | 53.15         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 12       | 53.15         |
| (1,111) | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 53.14         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 53.13         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 53.12         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 53.1          |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 53.1          |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 53.09         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 53.08         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 53.06         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 4        | 53.05         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 53.01         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 53.01         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 52.99         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 52.98         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 52.97         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 15       | 52.97         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 19       | 52.96         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 52.96         |
| (1,361) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 9        | 52.94         |
| (1,120) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 18       | 52.93         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 52.88         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 52.88         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1        | 52.86         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 52.86         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 52.86         |
| (1,47)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 52.86         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 52.85         |
| (1,402) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 52.85         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 52.85         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 52.84         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 52.82         |
| (1,177) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 52.82         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 52.81         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 52.78         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 52.77         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 52.75         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 52.75         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 52.74         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 52.7          |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 52.67         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 52.67         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 52.64         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 52.64         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 52.63         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 52.6          |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 52.59         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 52.59         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 52.58         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 52.57         |
| (1,542) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 52.56         |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 52.55         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 52.55         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 52.47         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 52.47         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 52.47         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 52.45         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 52.44         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 52.42         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 12       | 52.41         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 10       | 52.4          |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 52.37         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 52.36         |
| (1,105) | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 52.32         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 52.31         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 17       | 52.29         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 52.29         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 52.28         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 52.27         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 52.26         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 52.22         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 52.21         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 52.17         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 52.15         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 52.12         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 52.12         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 52.11         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 52.1          |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 52.05         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 52.03         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1        | 52.0          |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 51.97         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 51.97         |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 51.97         |
| (1,358) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 4        | 51.96         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 51.96         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 51.95         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 51.92         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 51.92         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 51.89         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 3        | 51.88         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 7        | 51.87         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 51.86         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 51.85         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 51.84         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 51.83         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 51.79         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 51.79         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 51.77         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 51.77         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 51.73         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 51.72         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 51.7          |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 51.7          |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 51.7          |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 12       | 51.65         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 51.63         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 51.61         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 51.57         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 51.57         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 7        | 51.53         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 51.52         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 51.49         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 51.47         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 2        | 51.44         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 51.44         |
| (1,128) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 51.43         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 51.42         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 51.42         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 51.4          |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 51.37         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 51.36         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 51.34         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 51.31         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 51.29         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 51.29         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 51.28         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 51.28         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 17       | 51.28         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 51.28         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 51.27         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 51.27         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 51.21         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 51.2          |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 51.2          |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 51.15         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 51.13         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 51.13         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 51.13         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 51.1          |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 51.08         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 15       | 51.06         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 16       | 51.04         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 51.03         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 51.02         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 51.01         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 50.96         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 50.95         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 50.93         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 50.92         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 50.92         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 4        | 50.91         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 50.91         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 50.9          |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 50.89         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 50.89         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 50.89         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 6        | 50.88         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 50.88         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 50.87         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 50.86         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 50.84         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 50.84         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 50.83         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 50.83         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 50.82         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 50.82         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 50.8          |
| (1,179) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 50.8          |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 50.79         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 20       | 50.78         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 50.78         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 50.76         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 50.73         |
| (1,392) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 50.71         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 50.7          |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 3        | 50.69         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 50.67         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 50.66         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 13       | 50.65         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 50.65         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 50.65         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 50.64         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 50.63         |
| (1,311) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 50.61         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 10       | 50.58         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 50.58         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 50.53         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 50.51         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 50.51         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 50.51         |
| (1,377) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 50.49         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 50.45         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 5        | 50.43         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 50.43         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 50.41         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 50.41         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 50.41         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 50.41         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 50.39         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 50.38         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 50.37         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 50.37         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 50.36         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 50.3          |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 50.29         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 50.29         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 50.29         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 50.26         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 50.26         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 50.25         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 50.24         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 50.22         |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 50.19         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 50.19         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 50.17         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 50.16         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 50.15         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 50.13         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 50.12         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 50.09         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 50.07         |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 50.07         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 50.06         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 50.05         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 5        | 50.01         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 49.97         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 49.91         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 49.9          |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 49.89         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 49.89         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 15       | 49.88         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 49.88         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 49.87         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 49.87         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 49.87         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 49.83         |
| (1,487) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 49.81         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 49.81         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 49.74         |
| (1,90)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 49.73         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 49.72         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 49.72         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 49.72         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 10       | 49.69         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 49.68         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 49.68         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 49.67         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 49.67         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 49.65         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 49.65         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 49.65         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 49.64         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 49.64         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 49.62         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 49.61         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 49.61         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 49.57         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 49.53         |
| (1,130) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 19       | 49.52         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 49.51         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 49.51         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 49.5          |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 49.5          |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 49.5          |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 49.49         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 49.48         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 49.48         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 17       | 49.47         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 4        | 49.46         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 49.46         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 49.45         |
| (1,215) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 49.44         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 49.44         |
| (1,291) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 49.43         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 49.41         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 49.41         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 49.38         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 49.33         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 49.27         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 49.26         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 49.26         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 49.25         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 49.24         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 49.22         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 49.21         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 49.2          |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 17       | 49.19         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 11       | 49.19         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 49.15         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 49.13         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 49.12         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 49.11         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 49.08         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 49.06         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 49.05         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 49.02         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 49.0          |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 48.99         |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 48.94         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 9        | 48.92         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 48.92         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 48.85         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 48.84         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 48.84         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 48.82         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 48.82         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 48.81         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 48.8          |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 48.79         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 48.77         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 48.75         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 16       | 48.72         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 48.64         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 48.6          |
| (1,372) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 48.54         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 48.53         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 48.49         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 48.46         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 48.43         |
| (1,451) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 48.4          |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 48.37         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 48.36         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 48.32         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 48.32         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 18       | 48.31         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 16       | 48.31         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 48.3          |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 48.3          |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 48.3          |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 48.29         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 48.29         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 48.28         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 48.27         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 48.24         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 48.2          |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 48.19         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 48.18         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 48.17         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 48.16         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 48.13         |
| (1,212) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 48.13         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 48.11         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 48.1          |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 48.08         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 48.06         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 48.06         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 48.05         |
| (1,331) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 9        | 48.03         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 48.01         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 48.01         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 8        | 47.98         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 47.98         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 47.95         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 47.93         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 47.91         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 47.91         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 47.89         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 47.88         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 47.88         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 47.88         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 47.86         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 47.86         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 47.86         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 47.86         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 47.85         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 47.85         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 47.85         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 3        | 47.82         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 47.82         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 47.81         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 13       | 47.81         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 47.78         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 47.77         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 47.76         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 47.75         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 47.75         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 47.74         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 47.74         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 47.73         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 47.72         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 47.72         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 47.7          |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 47.67         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 47.65         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 10       | 47.64         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 47.6          |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 47.58         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 47.56         |
| (1,89)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 47.55         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 47.55         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1        | 47.54         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 4        | 47.51         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 47.51         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 47.51         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 47.5          |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 47.48         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 47.46         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 47.46         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 47.45         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 47.45         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 47.43         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 47.41         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 47.41         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 47.4          |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 47.39         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 47.38         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 47.36         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 47.3          |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 47.3          |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 47.29         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 47.28         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 47.26         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 47.24         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 47.2          |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 47.2          |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 47.19         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 47.19         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 47.19         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 47.15         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 47.15         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 47.11         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 47.11         |
| (1,452) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 47.1          |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 19       | 47.09         |
| (1,327) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 47.09         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 47.09         |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 47.07         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 47.05         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 47.03         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 47.03         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 47.03         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 47.02         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 47.0          |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 46.99         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 46.99         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 17       | 46.98         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 46.97         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 46.97         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 46.97         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 46.96         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 46.94         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 46.93         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 19       | 46.91         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 46.9          |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 46.87         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 46.87         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 46.86         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 46.85         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 46.84         |
| (1,365) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 46.83         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 46.82         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 46.8          |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 46.78         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 46.78         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 46.76         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 46.76         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 46.76         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 46.76         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 46.71         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 46.68         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 46.68         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 10       | 46.66         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 46.65         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 46.64         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 46.6          |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 46.6          |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 46.58         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 46.56         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 46.54         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 46.54         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 46.53         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 46.52         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 7        | 46.44         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 46.43         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 6        | 46.42         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 46.4          |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 46.39         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 46.38         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 46.32         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 46.31         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 46.27         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 20       | 46.25         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 46.24         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 12       | 46.22         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 46.22         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 46.21         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 46.2          |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 46.19         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 46.18         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 46.18         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 46.17         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 46.15         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 46.15         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 46.15         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 12       | 46.14         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 46.12         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 46.12         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 46.1          |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 45.98         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 45.96         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 45.96         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 45.92         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 45.91         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 6        | 45.91         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 45.91         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 45.9          |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 45.89         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 45.87         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 45.87         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 45.85         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 45.77         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 45.76         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 45.73         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 45.72         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 45.71         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 45.71         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 45.71         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 45.67         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 45.66         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 45.63         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 45.62         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 45.61         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 45.61         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 45.58         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 45.56         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 45.56         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 45.53         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 14       | 45.5          |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 45.5          |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 45.49         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 45.47         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 45.47         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 45.46         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 45.45         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 45.45         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 45.43         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 45.35         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 45.32         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 45.3          |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 45.29         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 45.28         |
| (1,180) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 45.25         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 45.23         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 12       | 45.2          |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 45.2          |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 45.18         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 7        | 45.17         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 45.14         |
| (1,444) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 45.13         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 45.13         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 45.12         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 45.09         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 45.09         |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 2        | 45.08         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 7        | 45.06         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1        | 45.06         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 45.05         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 45.03         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 45.01         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 45.0          |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 44.99         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 44.99         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 44.98         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 44.95         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 44.92         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 44.88         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 44.87         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 44.86         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 44.86         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 44.85         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 44.84         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 44.83         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 44.82         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 44.81         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 4        | 44.79         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 44.79         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 14       | 44.78         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 8        | 44.78         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 44.76         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 44.69         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 44.68         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 44.68         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 14       | 44.6          |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 9        | 44.59         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 44.58         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 44.57         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 44.57         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 44.57         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 11       | 44.55         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 44.52         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 44.5          |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 44.5          |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 44.5          |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 13       | 44.49         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 44.41         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 44.41         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 44.39         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 44.37         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 44.34         |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 44.34         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 2        | 44.33         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 44.28         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 44.27         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 11       | 44.26         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 20       | 44.25         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 44.25         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 3        | 44.24         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 44.23         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 44.21         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 6        | 44.2          |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 44.18         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 44.16         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 20       | 44.13         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 44.12         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 44.11         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 17       | 44.09         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 44.08         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 19       | 44.08         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 44.08         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 9        | 44.07         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 44.0          |
| (1,216) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 43.97         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 43.96         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 43.94         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 43.94         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 43.93         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 13       | 43.92         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 7        | 43.91         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 43.88         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 43.86         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 43.86         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 43.86         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 43.85         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 43.82         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 8        | 43.79         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 43.76         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 43.76         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 43.75         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 43.73         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 43.73         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 43.71         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 43.69         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 43.69         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 43.67         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 43.65         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 43.64         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 43.63         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 43.62         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 43.61         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 43.6          |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 43.59         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 43.58         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 43.58         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 43.58         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 15       | 43.58         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 5        | 43.57         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 43.57         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 43.55         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 19       | 43.52         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1        | 43.51         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 43.5          |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 3        | 43.49         |
| (1,69)  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 43.49         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 43.46         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 12       | 43.46         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 43.46         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 43.42         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 43.42         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 43.39         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 43.38         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 43.38         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 10       | 43.38         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 13       | 43.34         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 43.34         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 43.31         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 43.3          |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 7        | 43.29         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 43.29         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 43.27         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 43.27         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 2        | 43.26         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 43.23         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 43.19         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 18       | 43.17         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 43.17         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 43.17         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 43.16         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 43.14         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 43.14         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 43.13         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 43.13         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 43.11         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 43.11         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 43.1          |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 43.09         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 43.07         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 43.07         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 43.06         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 43.05         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 43.03         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 43.02         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 43.0          |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 43.0          |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 43.0          |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 42.97         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 42.97         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 42.96         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 42.96         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 16       | 42.94         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 42.93         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 42.92         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 42.89         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 42.89         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 17       | 42.87         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 42.87         |
| (1,530) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 2        | 42.85         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 42.85         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 42.84         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 42.83         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 42.82         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 42.81         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 42.79         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 42.78         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 42.76         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 42.73         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 42.71         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 42.71         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 4        | 42.67         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 42.59         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 42.55         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 42.55         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 42.55         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 42.55         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 42.51         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 5        | 42.5          |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 42.5          |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 13       | 42.48         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 42.48         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 11       | 42.46         |
| (1,50)  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 42.46         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 42.45         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 42.45         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 42.42         |
| (1,39)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 42.41         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 18       | 42.4          |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 42.39         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 18       | 42.37         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 42.37         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 42.33         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 16       | 42.33         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 15       | 42.32         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 42.32         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 16       | 42.31         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 42.31         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 3        | 42.3          |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 42.28         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 42.25         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 7        | 42.23         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 42.21         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 42.19         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 42.16         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 42.16         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 42.14         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 3        | 42.11         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 42.1          |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 42.09         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 42.08         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 42.07         |
| (1,245) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 42.03         |
| (1,507) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 41.99         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 41.99         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 41.98         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 41.97         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 41.96         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 41.93         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 41.92         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 41.92         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 41.92         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 41.92         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 4        | 41.92         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 41.9          |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 41.89         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 41.87         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 41.87         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 18       | 41.83         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 41.83         |
| (1,505) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 19       | 41.79         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 41.78         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 41.78         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 41.77         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 41.77         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 41.76         |
| (1,435) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 41.75         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 41.74         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 41.7          |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 41.69         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 41.69         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 41.67         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 41.66         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 9        | 41.63         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 41.62         |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 41.6          |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 41.6          |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 41.6          |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 41.59         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 3        | 41.58         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 41.58         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 41.57         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 41.57         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 41.56         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 41.55         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 41.55         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 41.55         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 41.52         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 41.52         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 41.51         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 41.5          |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 41.49         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 41.49         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 41.48         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 41.48         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 41.47         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 16       | 41.46         |
| (1,227) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 41.46         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 41.45         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 41.44         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 41.43         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 41.42         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 41.42         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 41.41         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 41.38         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 41.3          |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 41.25         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 11       | 41.25         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 41.24         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 41.22         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 6        | 41.21         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 41.2          |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 41.18         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 41.17         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 41.17         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 41.13         |
| (1,537) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 12       | 41.12         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 7        | 41.09         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 41.08         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 11       | 41.08         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 41.08         |
| (1,107) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 41.07         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 41.03         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 41.03         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 41.03         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 41.0          |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 41.0          |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 40.98         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1        | 40.98         |
| (1,338) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 40.97         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 40.95         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 40.92         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 40.92         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 40.92         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 19       | 40.91         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 18       | 40.91         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 40.91         |
| (1,271) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 5        | 40.89         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 40.89         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 40.87         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 40.86         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 40.84         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 40.83         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 40.83         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 40.82         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 40.82         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 40.81         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 40.8          |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 40.78         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 40.77         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 40.77         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 40.75         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 9        | 40.64         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 40.63         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 40.61         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 40.61         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 40.6          |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 40.6          |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 2        | 40.58         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 40.58         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 40.58         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 40.56         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 40.54         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 40.54         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 40.54         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 40.53         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 9        | 40.51         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 40.5          |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 15       | 40.47         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 40.47         |
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 40.45         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 40.44         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 40.42         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 40.42         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 40.4          |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 40.4          |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 40.37         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 40.33         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 2        | 40.32         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 40.32         |
| (1,214) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 40.32         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 12       | 40.31         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 40.31         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 40.3          |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,565) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 40.28         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 40.27         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 3        | 40.26         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 40.25         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 40.25         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 17       | 40.23         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 40.22         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 40.18         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 12       | 40.14         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 40.14         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 40.14         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 40.13         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 40.12         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20       | 40.11         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 40.09         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 40.08         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 40.08         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 40.07         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 40.06         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 40.06         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 4        | 40.05         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 40.05         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 4        | 40.05         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 40.04         |
| (1,226) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 40.04         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 40.04         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 40.03         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 40.0          |
| (1,340) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 39.99         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 39.99         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 39.99         |
| (1,82)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 39.98         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 39.97         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 39.97         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 39.96         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 39.94         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 39.94         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 39.93         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 39.91         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 39.89         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 8        | 39.89         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 39.86         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 39.84         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 39.84         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 14       | 39.83         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 39.83         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 39.82         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 39.81         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 19       | 39.78         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 39.74         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 39.73         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 39.73         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 39.71         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 39.71         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 39.7          |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 8        | 39.7          |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 39.7          |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 39.66         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 18       | 39.65         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20       | 39.63         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 16       | 39.6          |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 39.59         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 39.57         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 6        | 39.56         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 19       | 39.56         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 39.55         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 39.52         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 39.47         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 39.45         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 15       | 39.44         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 6        | 39.39         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 39.37         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 39.35         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 39.35         |
| (1,66)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 39.33         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 39.32         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 39.28         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 39.26         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 39.25         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 39.24         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 39.24         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 39.22         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 39.21         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 39.21         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 39.21         |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 39.19         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 20       | 39.17         |
| (1,288) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 39.14         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 39.14         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 39.12         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 39.11         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 39.11         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 39.09         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 39.08         |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 39.06         |
| (1,543) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 5        | 39.05         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 39.05         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 39.05         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 39.04         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 39.04         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 39.03         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 39.02         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 38.99         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 38.97         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 5        | 38.96         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 6        | 38.93         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 38.89         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 38.88         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 38.86         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 38.83         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 38.81         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 38.79         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 38.79         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 38.77         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 38.75         |
| (1,528) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 38.73         |
| (1,261) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 38.71         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 38.69         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 17       | 38.69         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 38.66         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 2        | 38.66         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 6        | 38.64         |
| (1,249) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 38.61         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 38.6          |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 38.59         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 38.57         |
| (1,479) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 10       | 38.57         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 38.56         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 38.55         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 38.55         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 38.55         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 38.53         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 38.52         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 38.51         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 38.5          |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 11       | 38.48         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 38.47         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 38.44         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 14       | 38.44         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 38.39         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 38.36         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 38.35         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 5        | 38.33         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 38.32         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 38.31         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 38.25         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 38.25         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 38.25         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 38.23         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 38.22         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 38.22         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 38.21         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 38.2          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 38.17         |
| (1,423) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 38.15         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 38.15         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1        | 38.15         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 38.15         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 38.12         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 38.12         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 38.1          |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 7        | 38.1          |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 38.08         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 38.08         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 38.05         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 38.05         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 38.02         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 38.01         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 7        | 38.01         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 37.99         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 37.98         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 37.97         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 37.96         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 13       | 37.96         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 37.93         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 15       | 37.93         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 37.92         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 12       | 37.88         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 37.87         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 13       | 37.83         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 37.8          |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 37.79         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1        | 37.79         |
| (1,418) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 37.79         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 37.79         |
| (1,405) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 37.78         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 37.77         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 37.76         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 37.72         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 37.72         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 37.7          |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 37.69         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 37.69         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 37.69         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 37.67         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 37.67         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 37.65         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 37.64         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 9        | 37.64         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 37.6          |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 37.6          |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 37.59         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 37.58         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 37.57         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 7        | 37.55         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 37.55         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 37.55         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 3        | 37.53         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 37.51         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 37.5          |
| (1,429) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 37.47         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 37.46         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 37.45         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 37.44         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 37.44         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 37.43         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 37.41         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 37.38         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 37.38         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 37.37         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 3        | 37.36         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 37.33         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 37.33         |
| (1,260) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 37.32         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 37.32         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 37.31         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 37.29         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 37.27         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 37.24         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 37.22         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 37.22         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 4        | 37.21         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 37.21         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 17       | 37.19         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 37.18         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 37.16         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 37.14         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 37.14         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 8        | 37.11         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 37.11         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 16       | 37.1          |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 37.1          |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 37.08         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 37.08         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 37.07         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 37.04         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 11       | 36.97         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 36.95         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 36.95         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 36.94         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 36.91         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 36.87         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 36.87         |
| (1,396) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 36.86         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 36.85         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 36.85         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 36.84         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 36.81         |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 36.8          |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 36.79         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 36.78         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 36.78         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 36.77         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 36.77         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 10       | 36.72         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 5        | 36.68         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 36.67         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 36.66         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 13       | 36.66         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 36.65         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 6        | 36.64         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 36.63         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 36.61         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 36.6          |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 36.59         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 36.59         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 36.58         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 36.54         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 36.51         |
| (1,277) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 36.51         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 36.5          |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 36.49         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 36.49         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 36.48         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 36.47         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 36.42         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 36.42         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 36.41         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 13       | 36.4          |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 36.4          |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 36.38         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 15       | 36.38         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 36.38         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 15       | 36.37         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20       | 36.37         |
| (1,77)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 16       | 36.37         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 2        | 36.37         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 36.35         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 36.33         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 36.31         |
| (1,510) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 36.28         |
| (1,550) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 16       | 36.25         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 9        | 36.25         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 36.21         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 36.2          |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 36.2          |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 36.18         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 36.16         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 6        | 36.15         |
| (1,503) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 10       | 36.15         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 36.15         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 36.14         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 36.14         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 36.12         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 36.12         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 36.09         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 36.09         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 36.08         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 36.07         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 6        | 36.07         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 36.07         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 36.06         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 36.05         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 36.04         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 36.04         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 36.01         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 36.01         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 35.97         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 15       | 35.92         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 35.91         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 35.89         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 35.89         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 35.89         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 35.88         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 35.85         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 35.83         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 35.83         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 35.83         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 35.82         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 17       | 35.81         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 35.78         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 18       | 35.78         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 35.77         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 35.76         |
| (1,474) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 35.75         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 35.74         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 35.74         |
| (1,30)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 35.74         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 35.74         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 35.72         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 35.72         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 35.71         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 35.7          |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 35.69         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 35.61         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 35.61         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 35.59         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 35.58         |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 35.56         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 8        | 35.55         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 35.51         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 35.51         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 35.5          |
| (1,538) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 35.48         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 35.48         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 35.48         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 35.47         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 35.45         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 35.42         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 35.41         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 35.41         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 35.4          |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 35.39         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 35.37         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 35.36         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 35.36         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 35.34         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 35.32         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 35.32         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 35.32         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 35.29         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 35.28         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 35.27         |
| (1,491) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 35.26         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 35.26         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 35.25         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 35.25         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 35.23         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 35.22         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 35.19         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 35.18         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 35.18         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 35.16         |
| (1,499) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 35.13         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 35.12         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 35.12         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 35.11         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 35.1          |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 35.09         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 35.08         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 35.07         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 35.06         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 35.05         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 7        | 35.04         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 35.04         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 35.03         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 35.03         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 35.01         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 35.0          |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 34.99         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 34.98         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 34.98         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 34.96         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 34.94         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 34.94         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 34.93         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 3        | 34.92         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 34.92         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 34.92         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 34.91         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 5        | 34.9          |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 34.9          |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 34.89         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 34.83         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 34.81         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 34.8          |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 34.78         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 34.76         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 34.76         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 34.71         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 34.69         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 12       | 34.67         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 34.65         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 34.63         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 34.63         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 8        | 34.62         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 34.62         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 34.61         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 34.61         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 34.6          |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 34.6          |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 34.59         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 34.56         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 34.56         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 14       | 34.56         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 34.51         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 34.51         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 15       | 34.51         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 34.5          |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 34.5          |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 34.47         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 34.46         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 34.46         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 34.45         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 34.41         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 34.41         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 11       | 34.4          |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 34.4          |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 34.4          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 34.39         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 34.39         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 34.38         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 34.38         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 34.37         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 34.36         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 34.36         |
| (1,23)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 34.36         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 34.33         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 34.33         |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 34.29         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 34.28         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 34.27         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 34.25         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 34.25         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 11       | 34.25         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 34.25         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 34.24         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 34.24         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 6        | 34.23         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 34.21         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 34.21         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 34.19         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 34.18         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 34.18         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 34.18         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 3        | 34.17         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 34.16         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 34.16         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 34.15         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 34.15         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 34.14         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 34.12         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 34.12         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 34.1          |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 34.09         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 34.09         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 34.07         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 34.07         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 34.05         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 34.04         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 34.03         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20       | 34.03         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 34.02         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 34.02         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 33.99         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 33.94         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1        | 33.93         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 33.92         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 4        | 33.91         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 33.89         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 33.88         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 33.86         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 33.85         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 33.82         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 33.81         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 33.8          |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 33.79         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 33.79         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 2        | 33.77         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 33.77         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 33.77         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 33.76         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 33.72         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 33.7          |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 33.7          |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 33.69         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 18       | 33.67         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 33.66         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 33.66         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 33.65         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 33.65         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 33.64         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 33.64         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 33.62         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 2        | 33.62         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 33.6          |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 33.59         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 12       | 33.58         |
| (1,322) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 33.57         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 33.56         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 33.55         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 12       | 33.51         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 33.51         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 33.49         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 19       | 33.48         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 33.48         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 33.48         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 13       | 33.46         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 33.45         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 33.44         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 33.43         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 33.42         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 33.4          |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 33.39         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 33.37         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 33.36         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 33.34         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 33.33         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 33.33         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 33.32         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 33.32         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 14       | 33.31         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 33.31         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 33.3          |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 33.3          |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 33.28         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 15       | 33.26         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 33.26         |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 33.24         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 33.23         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 33.23         |
| (1,48)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 33.19         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 33.18         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 33.16         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 33.16         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 33.15         |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 33.14         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 33.13         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 15       | 33.12         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 5        | 33.11         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 33.09         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 33.09         |
| (1,65)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 33.09         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 33.09         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 33.07         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 33.06         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 33.05         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 33.04         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 33.03         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 33.0          |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 32.99         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 32.98         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 32.95         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 32.93         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 32.9          |
| (1,225) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 32.9          |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 32.84         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 32.82         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 32.82         |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 32.81         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 32.78         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 32.77         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 32.76         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 32.76         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 32.76         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 32.75         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 32.75         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 32.74         |
| (1,10)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 32.74         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 32.72         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20       | 32.7          |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 32.69         |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 32.69         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 32.68         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 32.67         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 32.66         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 32.66         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 32.66         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 32.64         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 32.64         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 13       | 32.6          |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 32.59         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 32.57         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 32.56         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 11       | 32.54         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 32.51         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 32.48         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 32.48         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 32.47         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 32.47         |
| (1,185) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 11       | 32.47         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 32.46         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 32.44         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 32.43         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 32.42         |
| (1,360) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 32.42         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 32.42         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 32.42         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 32.35         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 32.32         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 32.32         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 32.32         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 9        | 32.32         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 32.31         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 32.29         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 32.27         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 32.26         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 32.25         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 32.22         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 32.22         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 32.21         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 32.19         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 32.15         |
| (1,49)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 32.15         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 32.14         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 32.11         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 32.11         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 32.09         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 32.08         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 32.07         |
| (1,460) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 32.04         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 32.03         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 32.02         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 32.02         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 32.02         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 32.0          |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 31.98         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 31.98         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 31.96         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 15       | 31.95         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 9        | 31.95         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 31.95         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 31.93         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 31.93         |
| (1,382) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 31.9          |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 31.9          |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 31.89         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 31.87         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 31.85         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 31.84         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 31.83         |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 31.83         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 31.8          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 31.79         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 31.78         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 8        | 31.75         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 31.73         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 31.7          |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 31.7          |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 31.68         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 31.66         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1        | 31.63         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 16       | 31.62         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 31.61         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 31.6          |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 31.6          |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 31.59         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 31.57         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 31.56         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 31.56         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 31.55         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 31.55         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 31.53         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 31.52         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 31.52         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 31.51         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 31.48         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 31.48         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 31.47         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 31.44         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 31.44         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 31.4          |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 31.35         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 31.34         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 31.33         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 31.33         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 31.31         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 31.31         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 31.29         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 31.29         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 31.27         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 31.26         |
| (1,73)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 31.26         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 31.25         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 31.24         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 19       | 31.23         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 31.22         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 31.19         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 31.19         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 31.18         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 31.15         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 31.14         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 31.14         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 31.13         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 31.13         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 31.13         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 31.12         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 31.11         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 31.1          |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 31.08         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 31.08         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 31.08         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 31.03         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 31.03         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 31.03         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 31.01         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 8        | 31.01         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 31.01         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 30.99         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 30.97         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 30.96         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 11       | 30.94         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 10       | 30.93         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 30.93         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 30.92         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 30.91         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 30.91         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 30.89         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 30.87         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 30.85         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 30.83         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 30.77         |
| (1,544) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 10       | 30.74         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 30.7          |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 30.7          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 30.7          |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 30.64         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 30.63         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 30.63         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 30.61         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 30.61         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 30.59         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 19       | 30.59         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 30.59         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 30.58         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 30.57         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 30.57         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 30.57         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 30.56         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 30.56         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 30.56         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 30.54         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 30.53         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 30.52         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 30.51         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 30.48         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 30.47         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 30.44         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 13       | 30.42         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 30.42         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 30.41         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 30.4          |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 30.35         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 20       | 30.34         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 30.34         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 30.31         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 30.31         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 30.3          |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 30.29         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 4        | 30.29         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 30.29         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 30.28         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 30.27         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 30.24         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 14       | 30.2          |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 30.2          |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 30.15         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 30.13         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 30.13         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 30.1          |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 30.08         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 30.05         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 30.05         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 30.03         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 30.03         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1        | 30.03         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 11       | 30.02         |
| (1,53)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 29.96         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 29.95         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 29.95         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 29.9          |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 29.9          |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 11       | 29.89         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 29.88         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 29.87         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 29.85         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 29.85         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 2        | 29.82         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 29.82         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 29.79         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 29.78         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 29.74         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 29.74         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 29.74         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 29.73         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 29.73         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20       | 29.73         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 14       | 29.69         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 29.68         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 29.67         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 29.65         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 29.65         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 29.64         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 29.63         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 29.62         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 7        | 29.61         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 29.6          |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 29.57         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 29.57         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 29.54         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 29.54         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 29.52         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 29.52         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 29.51         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 29.49         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 29.45         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 29.44         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 29.43         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 29.42         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 29.42         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 29.41         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 29.41         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 16       | 29.41         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 29.4          |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 29.4          |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 29.39         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 29.37         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 29.35         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 29.35         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 29.31         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 29.31         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 29.3          |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 29.27         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 29.27         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 29.26         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 3        | 29.24         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 29.24         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 29.23         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 29.23         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 29.21         |
| (1,308) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 29.19         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 29.19         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 29.19         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 29.18         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 29.18         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 29.17         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 29.16         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 29.16         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 29.13         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 5        | 29.11         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 29.1          |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 29.1          |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 29.09         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 29.08         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 29.07         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 29.06         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 29.04         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 29.02         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 5        | 29.0          |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 28.99         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 18       | 28.97         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 28.96         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 9        | 28.96         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 28.93         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 28.9          |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 28.9          |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 28.9          |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 12       | 28.89         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 28.88         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 28.88         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 28.84         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 28.79         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 28.77         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 28.77         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 28.77         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 28.77         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 28.76         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 28.76         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 28.75         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 28.71         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 28.7          |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 19       | 28.7          |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 28.66         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 28.65         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 28.64         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 8        | 28.64         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 28.64         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 2        | 28.62         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 18       | 28.61         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 28.61         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 28.59         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 28.59         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 28.56         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 11       | 28.53         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 28.5          |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 28.48         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 28.48         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1        | 28.48         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 28.47         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 28.45         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 28.43         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 28.43         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 28.42         |
| (1,428) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 28.41         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 28.39         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 28.38         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 28.38         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 28.37         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 14       | 28.35         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 28.34         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 28.33         |
| (1,407) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 28.32         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 3        | 28.32         |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 28.31         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 28.29         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 28.27         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 2        | 28.26         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 28.25         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 28.24         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 28.21         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 6        | 28.21         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 28.2          |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 28.2          |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 28.2          |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 28.18         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 28.17         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 28.16         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 4        | 28.15         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 28.13         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 28.13         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 28.11         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 28.11         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 28.09         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 28.08         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 28.07         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 28.07         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 28.03         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 28.0          |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 27.98         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 27.96         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 27.96         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 27.95         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 27.95         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 27.94         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 27.93         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 27.92         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 27.9          |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 27.89         |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 27.89         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 27.88         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 27.85         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 19       | 27.85         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 27.84         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 27.84         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 27.83         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 27.83         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 27.83         |
| (1,218) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 27.82         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 27.81         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 27.81         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 27.8          |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 3        | 27.8          |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 27.77         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 4        | 27.77         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 27.75         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 27.73         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 12       | 27.71         |
| (1,45)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 27.71         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 27.7          |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 27.68         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 27.65         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 27.65         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 27.65         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 27.64         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 4        | 27.63         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 27.63         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 27.63         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 27.62         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 27.61         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 27.61         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 14       | 27.61         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 27.61         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 27.55         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 4        | 27.54         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 27.49         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 27.45         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 27.44         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 18       | 27.42         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 27.41         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 27.41         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 27.39         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 27.38         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 27.38         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 27.33         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 27.32         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 3        | 27.32         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 27.31         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 27.27         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 27.27         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 27.25         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 27.23         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 27.22         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 27.19         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 27.16         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 15       | 27.15         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 27.14         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 27.14         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 27.14         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 27.13         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 27.13         |
| (1,24)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 27.13         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 27.12         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 27.12         |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 27.11         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 27.11         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 27.1          |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 27.1          |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 27.09         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 27.07         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 27.07         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 27.07         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 27.05         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 27.04         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 27.04         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 27.03         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 27.01         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 27.0          |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 7        | 27.0          |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 26.97         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 26.96         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 26.96         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 26.95         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 26.94         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 26.93         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 26.92         |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 14       | 26.89         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 26.89         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 12       | 26.88         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 26.84         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 26.84         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 26.84         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 26.83         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 26.83         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 26.81         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 9        | 26.8          |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 26.8          |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 26.79         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 26.76         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 26.76         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 26.76         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 26.74         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 26.71         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 26.71         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 26.7          |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 26.68         |
| (1,534) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 26.67         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 11       | 26.67         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 26.67         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 26.67         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 26.66         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 26.66         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 26.63         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 26.62         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 14       | 26.6          |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 26.6          |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 9        | 26.59         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 26.58         |
| (1,389) | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 26.55         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 26.55         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 26.54         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 6        | 26.54         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 26.54         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 26.47         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 26.45         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 26.43         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 10       | 26.43         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 26.41         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 26.41         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 26.39         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 26.37         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 12       | 26.34         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 26.34         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 26.33         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 26.28         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 26.25         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 26.24         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 26.23         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 26.22         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 26.2          |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 26.2          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 26.2          |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 26.19         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 10       | 26.19         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 26.19         |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 26.17         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 26.17         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 26.16         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 26.15         |
| (1,455) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 26.15         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 26.15         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 26.15         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 26.15         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 26.14         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 26.14         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 26.14         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 26.11         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 26.1          |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 26.08         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 26.08         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 26.07         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 26.07         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 26.06         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 26.02         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 26.01         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 26.01         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 26.0          |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 25.99         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 25.99         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 16       | 25.98         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 25.98         |
| (1,546) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 25.97         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 25.95         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 25.95         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 25.94         |
| (1,210) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 25.93         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 25.91         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 25.86         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 25.86         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 25.85         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 16       | 25.84         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 25.83         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 25.83         |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 25.82         |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 25.81         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 25.81         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 25.8          |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 25.78         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 25.78         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 25.78         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 25.77         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 25.76         |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 25.75         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 25.74         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 25.73         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 5        | 25.73         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 25.7          |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 25.67         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 25.63         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 25.63         |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 17       | 25.62         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 25.61         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 25.58         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 25.57         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 25.56         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 25.56         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 25.55         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 25.55         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 13       | 25.54         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 25.54         |
| (1,506) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 25.52         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 25.51         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 25.5          |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 25.49         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 25.46         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 9        | 25.44         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 25.44         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 19       | 25.43         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 25.42         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 25.42         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 4        | 25.4          |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 25.4          |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 25.39         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 25.38         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 25.37         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 13       | 25.35         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 25.33         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 25.31         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 25.31         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 25.28         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 25.27         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 25.26         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 25.25         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 25.25         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 25.22         |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 2        | 25.19         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 25.17         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 25.15         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 25.15         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 25.15         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 25.14         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 25.13         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 25.09         |
| (1,188) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 25.09         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 25.09         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 20       | 25.07         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 25.06         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 25.04         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 24.99         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 24.99         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 24.98         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 24.98         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 24.98         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 24.97         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 24.97         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 24.97         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 24.95         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 18       | 24.94         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 24.94         |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 24.91         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 24.89         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 24.87         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 15       | 24.86         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 10       | 24.86         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 24.86         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 24.85         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 24.8          |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 24.8          |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 5        | 24.78         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 24.77         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 24.74         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 24.72         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 9        | 24.72         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 24.7          |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 24.7          |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 8        | 24.7          |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 11       | 24.7          |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 24.7          |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 13       | 24.68         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 24.67         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 24.66         |
| (1,417) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 24.65         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 24.64         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 24.63         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 24.58         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 6        | 24.57         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 24.56         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 24.56         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 24.56         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 24.56         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 8        | 24.54         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 24.52         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 24.5          |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 24.5          |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 24.47         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 24.45         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 24.45         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 24.44         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1        | 24.43         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 24.43         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 24.42         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 24.42         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 24.4          |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 24.39         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 24.39         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 24.37         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 24.36         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 24.36         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 24.35         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 24.35         |
| (1,72)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 24.33         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 24.32         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 24.32         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 24.31         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 24.31         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 24.3          |
| (1,166) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 20       | 24.3          |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 10       | 24.3          |
| (1,405) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 24.28         |
| (1,40)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 9        | 24.26         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 24.24         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 24.23         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 24.21         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 24.21         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 24.2          |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 24.2          |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 17       | 24.2          |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 24.19         |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 24.18         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 24.18         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 24.17         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 24.16         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 8        | 24.15         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 24.15         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 18       | 24.14         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 15       | 24.14         |
| (1,218) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 24.12         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 24.12         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 24.11         |
| (1,7)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 24.06         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 24.05         |
| (1,247) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 24.03         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 14       | 24.03         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 24.02         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 23.99         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 23.97         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 23.97         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 23.96         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 23.94         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 23.93         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 23.93         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 23.93         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 23.93         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 23.92         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 23.91         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 23.91         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 23.89         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 23.88         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 23.88         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 23.84         |
| (1,103) | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 23.81         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 23.78         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 23.72         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 23.72         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 23.72         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 23.71         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 23.7          |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 3        | 23.7          |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 23.69         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 23.68         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 23.68         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 5        | 23.68         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 15       | 23.67         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 23.66         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 23.65         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 23.65         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 8        | 23.64         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 16       | 23.63         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 23.62         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 23.62         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 23.62         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 23.61         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 7        | 23.61         |
| (1,543) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 9        | 23.59         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 23.57         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 23.57         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 23.57         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1        | 23.53         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 23.51         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 23.51         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 2        | 23.5          |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 23.49         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 6        | 23.49         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 23.49         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 14       | 23.48         |
| (1,112) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1        | 23.48         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 23.47         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 15       | 23.45         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 23.44         |
| (1,173) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 17       | 23.44         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 23.44         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 23.42         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 23.42         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 23.42         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 23.42         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 23.4          |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 23.4          |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 23.39         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 23.38         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 23.38         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 23.38         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 23.37         |
| (1,354) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 23.35         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 23.35         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 23.35         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 23.35         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 23.33         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 23.33         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 23.3          |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 23.3          |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 23.27         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 23.27         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 23.26         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 23.26         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 23.23         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 23.23         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 23.23         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 23.23         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 23.22         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 23.2          |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 23.19         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 23.17         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 23.16         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 23.15         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 23.13         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 23.13         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 23.13         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 23.12         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 23.12         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 23.12         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 23.12         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 8        | 23.11         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 23.11         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 23.11         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 23.1          |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 23.07         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 23.05         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 23.04         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 23.04         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 23.04         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 23.03         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 23.01         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 22.99         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 22.99         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 22.99         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 22.98         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 22.96         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 22.95         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 22.95         |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 22.94         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 22.94         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 22.93         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 22.91         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 22.9          |
| (1,370) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 4        | 22.89         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 22.88         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 22.88         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 22.87         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 22.87         |
| (1,55)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 22.87         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 22.84         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 22.84         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 22.83         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 22.83         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 22.82         |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 22.82         |
| (1,433) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 22.82         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 22.82         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 22.81         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 22.81         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 22.76         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 22.76         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 22.72         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 15       | 22.72         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 22.69         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 22.69         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 22.69         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 22.69         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20       | 22.65         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 22.64         |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 22.63         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 22.6          |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 22.59         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 22.58         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 22.58         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 5        | 22.57         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 22.56         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 22.53         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 22.52         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 11       | 22.51         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 22.51         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 22.5          |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 22.5          |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 22.48         |
| (1,38)  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 22.48         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 22.47         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 22.47         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 22.45         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 10       | 22.43         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 22.42         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 22.42         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 22.4          |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 22.39         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 22.38         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 22.38         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 22.38         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 22.38         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 22.38         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 22.36         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 22.36         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 22.35         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 22.34         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 22.32         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 22.32         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 22.31         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 22.3          |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 22.3          |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 22.3          |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 22.28         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 22.27         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 22.23         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 22.19         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 22.16         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 9        | 22.16         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 22.15         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 22.15         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 22.15         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 18       | 22.14         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 22.12         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 22.11         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 22.1          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 22.1          |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 22.08         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 22.06         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 16       | 22.06         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 22.06         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 22.04         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 22.03         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 22.0          |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 22.0          |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 21.99         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 21.98         |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 21.97         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 21.95         |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 21.94         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 21.94         |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 21.93         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 21.92         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 21.91         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 21.88         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 21.88         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 21.85         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 21.84         |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 21.83         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 21.83         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 21.81         |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 21.81         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 20       | 21.81         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 21.79         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 21.79         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 21.78         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 21.77         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 21.74         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 21.71         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 21.71         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 21.69         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 21.68         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 21.65         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 21.64         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 21.62         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 21.62         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 21.62         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 21.6          |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 21.6          |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 21.58         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 21.57         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 21.53         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 13       | 21.52         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 21.51         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 2        | 21.48         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 21.45         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 21.45         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 21.44         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 21.43         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 21.42         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 19       | 21.41         |
| (1,147) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 21.41         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 21.39         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 21.38         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 21.36         |
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 21.33         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 21.32         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 21.32         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 21.31         |
| (1,532) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 21.3          |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 21.29         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 21.28         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 21.27         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 21.26         |
| (1,387) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 21.26         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 12       | 21.26         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 21.26         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 21.24         |
| (1,269) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 21.24         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 4        | 21.21         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 21.2          |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 21.2          |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 21.19         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 21.19         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 21.18         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 21.18         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 21.17         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 21.17         |
| (1,21)  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 21.17         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 21.17         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 7        | 21.16         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 21.15         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 21.15         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 21.15         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 21.11         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 21.11         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 18       | 21.11         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 21.1          |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 21.08         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 19       | 21.07         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 21.07         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 5        | 21.06         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 21.05         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 21.03         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 21.03         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 3        | 21.02         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 21.02         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 21.02         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 21.01         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 21.01         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 21.0          |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 20.97         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 20.97         |
| (1,70)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 20.97         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 20.96         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 20.96         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 20.95         |
| (1,275) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 20.94         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 20.94         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 20.94         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 20.93         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 20.92         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 20       | 20.9          |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 20.85         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 20.85         |
| (1,85)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 20.85         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 20.84         |
| (1,416) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 20.84         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 20.84         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 20.8          |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 20.8          |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 20.79         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 20.77         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 20.77         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 20.77         |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 11       | 20.75         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 20.73         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 20.73         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 20.72         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 20.71         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 20.71         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 20.7          |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 20.69         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 20.69         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 20.66         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 20.64         |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 20.63         |
| (1,54)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 20.61         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 20.6          |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 20.58         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 20.58         |
| (1,409) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 20.58         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 20.58         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 20.57         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 20.56         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 20.54         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 20.54         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 20.54         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 20.53         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 20.52         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 20.52         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 20.51         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 20.51         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 20.48         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 17       | 20.48         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 20.45         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 20.44         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 20.44         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 20.43         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 20.42         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 20.42         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 20.41         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 20.39         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 7        | 20.36         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 20.35         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 14       | 20.3          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 15       | 20.3          |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 20.27         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 20.27         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 20.26         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 20.26         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1        | 20.26         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 20.25         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 20.25         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 20.22         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 20.22         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 20.21         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 20.19         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 20.18         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 20.17         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 20.15         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 20.15         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 20.14         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 20.14         |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 20.13         |
| (1,61)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 20.13         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 20.12         |
| (1,319) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 20.09         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 20.08         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 20.08         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 20.07         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 20.07         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 20.07         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 20.06         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 20.06         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 3        | 20.06         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 20.02         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 19.99         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 19.99         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 19.98         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 19.95         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 19.93         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 19.92         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 19.92         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 19.9          |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 19.9          |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 19.87         |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 19.87         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 19.87         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 19.86         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 19.86         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 19.84         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 19.82         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 19.82         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 19.8          |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 19.8          |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 19.8          |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 19.79         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 19.78         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 19.78         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 19.77         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 3        | 19.77         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 19.76         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 19.76         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 19.76         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 19.75         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 19.75         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 19.74         |
| (1,25)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 19.73         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 19.68         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 19.65         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 19.64         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 19.63         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 19.63         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 19.62         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 19.62         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 19.61         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 19.6          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 19.59         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 19.57         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 18       | 19.57         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 19.57         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 19.54         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 19.53         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 19.52         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 19.52         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 19.48         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 19.45         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 19.45         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 19.45         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 19.44         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 19.43         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 19.42         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 19.42         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 5        | 19.42         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 19.41         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 19.4          |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 19.4          |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 19.38         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 19.37         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 19.35         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 19.34         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 19.28         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 19.26         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 19.26         |
| (1,20)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 19.25         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 19.25         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 19.22         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 19.2          |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 19.2          |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 19.19         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 19.16         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 19.16         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 19.15         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 19.15         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 19.15         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 19.13         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 19.13         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 19.13         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 19.11         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 19.06         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 19.06         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 19.06         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 19.03         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 19.03         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 19.01         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 19       | 18.97         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 18.96         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 18.96         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 18.96         |
| (1,384) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 18.94         |
| (1,44)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 18.94         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 18.92         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 18.92         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 18.92         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 18.91         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 18.91         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 18.9          |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 18.88         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 18.86         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 18.86         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 18.85         |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 5        | 18.85         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 18.85         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 18.84         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 11       | 18.83         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 18.82         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1        | 18.77         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 18.76         |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 18.72         |
| (1,486) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 6        | 18.69         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 18.69         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 19       | 18.69         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 18.68         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 18.68         |
| (1,31)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 18.68         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 18.67         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 18.67         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 18.66         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 18.65         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 18       | 18.64         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 18.63         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 10       | 18.63         |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 18.61         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 7        | 18.61         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 18.61         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 18.6          |
| (1,256) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 18.6          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 18.59         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 18.57         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 18.54         |
| (1,154) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1        | 18.54         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 18.53         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 18.51         |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 18.5          |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 18.5          |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 18.49         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 18.48         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 18.48         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 18.45         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 18.45         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 17       | 18.42         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 18.41         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 18.4          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 18.4          |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 18.39         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 18.37         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 18.36         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 8        | 18.32         |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 18.28         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 18.27         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 18.25         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 4        | 18.24         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 18.23         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 3        | 18.23         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 18.22         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 18.22         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 18.22         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 18.2          |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 18.19         |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 18.18         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 18.18         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 18.15         |
| (1,304) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 18.11         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 18.1          |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 2        | 18.08         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 18.08         |
| (1,495) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 17       | 18.08         |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 18.07         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 18.05         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 18.05         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 18.01         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 18.01         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 18.0          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 17.98         |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 17.89         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 17.89         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 17.87         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 17.86         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 17.86         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 17.85         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 14       | 17.84         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 17.84         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 16       | 17.83         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 17.83         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 17.81         |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 17.8          |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 17.79         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 6        | 17.78         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 17.75         |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 17.73         |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 17.71         |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 17.71         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 17.71         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 7        | 17.69         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 17.67         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 17.66         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 17.65         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 17.64         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 17.61         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 17.6          |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 9        | 17.59         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 17.58         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 20       | 17.58         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 17.56         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 17.54         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 17.54         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 17.54         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 17.53         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 17.5          |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 6        | 17.49         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 17.48         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 11       | 17.47         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 17.46         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 17.45         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 17.45         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 17.43         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 17.42         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 17.41         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 17.37         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 17.37         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 17.35         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 17.34         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 17.34         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 2        | 17.32         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 17.32         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 17.3          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 13       | 17.3          |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 17.29         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 17.29         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 17.28         |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 17.28         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1        | 17.28         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 17.26         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 17.26         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 17.25         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 17.24         |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 17.23         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 10       | 17.2          |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 17.2          |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 17.18         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 20       | 17.17         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 17.15         |
| (1,560) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 17.13         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 17.13         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 17.13         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 17.11         |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 17.11         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 17.1          |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 17.08         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 17.07         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 14       | 17.05         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 17.02         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 17.01         |
| (1,253) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 17.01         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 17.01         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 17.0          |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 4        | 17.0          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 16.97         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 16.94         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 16.93         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 16.92         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 16.91         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 16.9          |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 16.87         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 16.86         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 16.85         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 16.81         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 16.81         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 16.8          |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 16.79         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 16.79         |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 16.78         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 16.78         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 16.77         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 16.77         |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 16.76         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 16.75         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 16.75         |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 16.75         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 16.74         |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 16.73         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 16.73         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 16.73         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 16.7          |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 16.69         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 16.67         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 16.66         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 8        | 16.64         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 16.62         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 9        | 16.6          |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 16.6          |
| (1,241) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 2        | 16.59         |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 16.57         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 16.57         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 16.56         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 16.54         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 16.53         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 12       | 16.53         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 16.46         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20       | 16.44         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 16       | 16.43         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 19       | 16.43         |
| (1,324) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 16.42         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 16.42         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 16.42         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 16.41         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 16.38         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 16.36         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 12       | 16.35         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 16.33         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 16.33         |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 16.3          |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 16.28         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 16.27         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 16.27         |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 16.22         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 10       | 16.22         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 16.21         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 13       | 16.2          |
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 16.17         |
| (1,136) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 17       | 16.15         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 14       | 16.13         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 16.11         |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 16.09         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 16.09         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 16.08         |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 16.08         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 16.08         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 16.08         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 16.06         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 16.03         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 16.03         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 7        | 16.0          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 14       | 15.98         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 15.97         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 15.96         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 4        | 15.93         |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 15.92         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 15.92         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 15.92         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 15.91         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 15.9          |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 15.86         |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 7        | 15.86         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 6        | 15.85         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 15.85         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 15.84         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 15.83         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 15.81         |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 15.81         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 15.77         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 6        | 15.77         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 15.76         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 15.76         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 15.73         |
| (1,496) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 15.73         |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 15.7          |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 15.69         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 15.65         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 17       | 15.64         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 15.63         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 15.62         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 15.62         |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 15.6          |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 15.56         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 15.55         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 15.54         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 15.53         |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 15.52         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 15.5          |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 15.48         |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 15.46         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 15.45         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 15.44         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 15.43         |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 15.42         |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 15.41         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 15.4          |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 13       | 15.4          |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 15.38         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 15.38         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 15.38         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 15.38         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 15.36         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 15.33         |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 15.29         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 15.29         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 15.28         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 15.26         |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 15.25         |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 15.25         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 15.25         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 15.24         |
| (1,334) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 15.23         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 15.22         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 19       | 15.22         |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 15.2          |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 15.2          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 15.19         |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 15.19         |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 15.17         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 15.16         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 8        | 15.14         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 15.14         |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 15.12         |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 15.12         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 15.12         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 15.1          |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 15.09         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 15.09         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 15.07         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 15.07         |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 8        | 15.06         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 15.05         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 15.03         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 15.03         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 15.02         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 15.02         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 15.0          |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 15.0          |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 15.0          |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 15.0          |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 14.96         |
| (1,252) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 14.93         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 14.92         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 14.91         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 14.9          |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 14.89         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 14.89         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 14.86         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 14.86         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 14.85         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 14.81         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 14.81         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 14.8          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 14.78         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 14.78         |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 14.76         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 14.76         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 14.74         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 14.73         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 14.73         |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 14.72         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 14.72         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 14.71         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 14.7          |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 14.7          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 13       | 14.67         |
| (1,101) | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 14.66         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 14.65         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 14.63         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 14.62         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 14.61         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 14.6          |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 14.59         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 18       | 14.59         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 14.56         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 14.56         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 14.54         |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 14.54         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 14.53         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 14.53         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 14.52         |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 14.52         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 14.52         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 14.52         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 14.51         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 14.51         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 14.51         |
| (1,332) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 14.5          |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 14.49         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 14.49         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 14.49         |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 14.48         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 14.46         |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 14.44         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 14.44         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 14.44         |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 16       | 14.4          |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 14.39         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 14.39         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 14.38         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 14.37         |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 14.36         |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 14.35         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 19       | 14.34         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 14.29         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 14.29         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 14.27         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 14.27         |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 14.25         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 14.25         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 14.24         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 14.22         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 14.22         |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 14.21         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 14.2          |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 14.19         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 14.17         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 14.16         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 14.16         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 14.15         |
| (1,336) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 14.13         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 4        | 14.13         |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 14.12         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 14.09         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 14.09         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 14.07         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 14.06         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 14.06         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 14.04         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 14.04         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 12       | 14.02         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 14.02         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 14.02         |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 11       | 14.01         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 14.0          |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 14.0          |
| (1,268) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 13.96         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 13.95         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 13.93         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 13.92         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 13       | 13.92         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 13.92         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 13.9          |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 13.87         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 13.86         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 13.86         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 13.85         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 13.84         |
| (1,471) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 13.84         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 13.84         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 13.84         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 13.83         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 3        | 13.83         |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 13.83         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 12       | 13.81         |
| (1,543) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 16       | 13.8          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 13.79         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 13.79         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 13.79         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 13.78         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 13.78         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 13.74         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 13.72         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 13.67         |
| (1,148) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1        | 13.67         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 13.65         |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 13.62         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 13.6          |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 13.6          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 5        | 13.59         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 13.59         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 13.59         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 13.56         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 13.56         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 13.56         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 13.54         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 13.53         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 13.52         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 13.52         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 13.48         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 13.42         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 13.42         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 13.42         |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 13.41         |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 13.38         |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 13.38         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 13.38         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 13.37         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 13.37         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 13.36         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 16       | 13.36         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 13.35         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 13.35         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 13.35         |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 4        | 13.33         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 13.33         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 13.32         |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 13.31         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 13.31         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 13.3          |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 13.28         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 13.28         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 13.28         |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 13.25         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 13.25         |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 17       | 13.24         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 13.24         |
| (1,17)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 13.24         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 13.23         |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 18       | 13.2          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 13.2          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 13.19         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 11       | 13.18         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 13.18         |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 13.17         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 3        | 13.17         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 13.15         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 13.15         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 13.13         |
| (1,292) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 13.13         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 13.13         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 13.12         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 13.11         |
| (1,475) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 13.11         |
| (1,251) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 13.11         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 13.11         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 13.1          |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 13.1          |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 13.08         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 13.05         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 13.04         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 13.03         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 13.01         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 13.0          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 10       | 12.98         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 12.98         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 12.98         |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 12.98         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 12.96         |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 12.92         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 12.89         |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 12.88         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 12.86         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 12.86         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 12.85         |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 12.83         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 18       | 12.82         |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 12.82         |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 12.81         |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 12.81         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 12.8          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 12.79         |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 12.76         |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 13       | 12.75         |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 12.75         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 12.75         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 12.75         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 12.72         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 12.72         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 12.72         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 12.71         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 12.71         |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 12.7          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 4        | 12.7          |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 12.69         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 12.66         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 7        | 12.65         |
| (1,533) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 12.63         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 2        | 12.63         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 10       | 12.63         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 12.62         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 12.61         |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 17       | 12.61         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 12.6          |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 12.59         |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 12.59         |
| (1,19)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 12.59         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 12.57         |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 12.55         |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 8        | 12.55         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 12.55         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 12.54         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 12.53         |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 12.53         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 12.52         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 12.51         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 12.51         |
| (1,545) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 12.5          |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 12.5          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 12       | 12.5          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 12.48         |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 7        | 12.47         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 12.47         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 12.46         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 12.45         |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 12.44         |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 12.44         |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 12.44         |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 12.44         |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 15       | 12.43         |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 12.43         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 12.43         |
| (1,395) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 12.41         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 12.41         |
| (1,60)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 12.39         |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 12.38         |
| (1,367) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 12.36         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 12.35         |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 12.34         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 12.34         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 12.34         |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 12.32         |
| (1,244) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 12.32         |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 12.32         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 12.31         |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 12.31         |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 12.29         |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 9        | 12.28         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 9        | 12.27         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 12.26         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 12.25         |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 12.24         |
| (1,508) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 12.21         |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 12.21         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 12.21         |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 12.2          |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 12.2          |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 11       | 12.19         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 12.18         |
| (1,34)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 12.18         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 1        | 12.17         |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 12.14         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 12.12         |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 5        | 12.12         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 12.12         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 12.11         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 12.09         |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 4        | 12.04         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 12.04         |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 12.01         |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 12.01         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 12.0          |
| (1,470) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 12.0          |
| (1,501) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 11.99         |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 11.96         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 11.93         |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 11.93         |
| (1,58)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 11.93         |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 11.92         |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 11.92         |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 16       | 11.91         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 11.91         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 2        | 11.91         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 11.89         |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 11.89         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 11.85         |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 11.84         |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 11.84         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 11.83         |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 11.81         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 11.8          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 11.79         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 11.79         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 11.79         |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 11.79         |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 11.78         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 11.78         |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 11.76         |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 13       | 11.75         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 11.74         |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 11.71         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 11.7          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 11.69         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 11.68         |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 11.68         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 11.67         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 11.65         |
| (1,317) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 11.62         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 11.62         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 11.58         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 11.57         |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 11.57         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 11.57         |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 11.56         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 11.55         |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 11.53         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 11.53         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 11.51         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 11.51         |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 11.49         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 11.48         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 11.48         |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 11.46         |
| (1,259) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 11.46         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 11.44         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 11.44         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 11.41         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 11.39         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 11.35         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 11.34         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 11.33         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 11.33         |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 16       | 11.33         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 5        | 11.33         |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 4        | 11.32         |
| (1,371) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 11.32         |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 8        | 11.32         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 11.31         |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 11.3          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 11.3          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 5        | 11.27         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 11.27         |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 11       | 11.26         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 11.24         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 11.24         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 11.23         |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 11.23         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 11.22         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 11.21         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 11.21         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 9        | 11.2          |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 11.2          |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 11.2          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 8        | 11.2          |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 11.15         |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 11.15         |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 11.15         |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 11.15         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 11.14         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 11.13         |
| (1,102) | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 11.13         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 11.13         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 11.09         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,371) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 11.08         |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 11.08         |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 9        | 11.07         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 5        | 11.07         |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 9        | 11.06         |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 11.05         |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 11.04         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 20       | 11.04         |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 11.04         |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 14       | 11.04         |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 16       | 11.03         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 11.02         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 11.02         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 11.01         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 11.01         |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 4        | 10.99         |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 10.98         |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 10.97         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 10.94         |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 10.92         |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 10.92         |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 10.9          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 11       | 10.89         |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 10.89         |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 10.89         |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 19       | 10.88         |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 10.87         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 10.87         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 10.83         |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 10.83         |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 10.83         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 10.82         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 10.81         |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 10.78         |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 2        | 10.76         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 10.74         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 10.74         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 10.74         |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 10.72         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 10.72         |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 10.72         |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 10.71         |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 10.7          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 10.69         |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 16       | 10.68         |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 15       | 10.68         |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 10.66         |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 13       | 10.65         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 10.64         |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 10.64         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 10.62         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 18       | 10.6          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 10.59         |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 10.58         |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 5        | 10.57         |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 8        | 10.56         |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 10.55         |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 10.53         |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 19       | 10.49         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 10.49         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 10.47         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 10.47         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 10.47         |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 10.46         |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 10.45         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 10.42         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 10.41         |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 10.4          |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 10.39         |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 10.38         |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 8        | 10.37         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 10.37         |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 10.36         |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 10.36         |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 10.34         |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 18       | 10.34         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 10.33         |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 10.32         |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 10.31         |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 10.3          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 18       | 10.3          |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 10.26         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 10.26         |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 10.25         |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 10.23         |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 12       | 10.22         |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 10.21         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 10.2          |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 10.2          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 3        | 10.19         |
| (1,475) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 10.18         |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 10.18         |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 10.16         |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 10.16         |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 10.15         |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 8        | 10.15         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 10.15         |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 10.13         |
| (1,516) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 10.12         |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 12       | 10.11         |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 20       | 10.09         |
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 15       | 10.08         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 10.07         |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 10.07         |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 10.05         |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 10.04         |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 10.02         |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 14       | 10.01         |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 10.0          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 10.0          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 11       | 10.0          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 9.99          |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 9.98          |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 9.97          |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 9.96          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 9.96          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 9.95          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 9.93          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 9.93          |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 9.93          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 9.93          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 9.92          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 5        | 9.92          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 9.91          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 9.91          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 15       | 9.89          |
| (1,28)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 17       | 9.89          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 9.89          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 6        | 9.86          |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 9.83          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 9.82          |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 9.81          |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 9.81          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 9.8           |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 9.8           |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 9.8           |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 5        | 9.78          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 9.72          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 9.71          |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 9.71          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 9.71          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 9.66          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 9.66          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 9.66          |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 9.65          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 15       | 9.64          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 9.63          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 9.62          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 9.61          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 6        | 9.61          |
| (1,175) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 9.59          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 9.54          |
| (1,174) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 9.54          |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 9.53          |
| (1,228) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 9.52          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 9.52          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 9.51          |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 9.51          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 9.5           |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 12       | 9.48          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 3        | 9.47          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1        | 9.46          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 9.46          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 9.45          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 9.43          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 9.43          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 17       | 9.43          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 9.42          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 9.42          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 9.41          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 17       | 9.41          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 9.41          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 3        | 9.4           |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 9.39          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 9.39          |
| (1,411) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 9.38          |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 9.38          |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 19       | 9.37          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 9.35          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 17       | 9.33          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 9.32          |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 9.32          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 9.32          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 10       | 9.3           |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 10       | 9.29          |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 9.28          |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 9.28          |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 9.28          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 9.27          |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 9.27          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 7        | 9.26          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 18       | 9.25          |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 9.25          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1        | 9.25          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 9.25          |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 9.23          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 9.23          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 18       | 9.22          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 9.22          |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 9.22          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 9.2           |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 9.19          |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 9.18          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 9.17          |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,466) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 9.16          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 9.16          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 7        | 9.16          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 9.15          |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 9.14          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 9.14          |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 9.13          |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 10       | 9.1           |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 10       | 9.1           |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 9.1           |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 3        | 9.09          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 9.08          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 9.06          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 9.06          |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 19       | 9.05          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 9.02          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 2        | 9.01          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 9.01          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 9.0           |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 4        | 9.0           |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 8.99          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 8.98          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 8.97          |
| (1,187) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 8.97          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 8.97          |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 8.96          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 8.92          |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 8.92          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 17       | 8.91          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 8.91          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 8.91          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 8.9           |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 18       | 8.89          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 12       | 8.88          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 17       | 8.88          |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 8.88          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 16       | 8.87          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 8.86          |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 8.86          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 8.86          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 8.85          |
| (1,315) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 8.85          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 13       | 8.84          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 8.82          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 8.81          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 8.81          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 8.8           |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 8.8           |
| (1,441) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 16       | 8.79          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 8.79          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 8.78          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 8.78          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 8.78          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 8.77          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 8.76          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 8.76          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 12       | 8.75          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 8.74          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 8.74          |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 8.74          |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 8.74          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 11       | 8.74          |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 8.73          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 8.72          |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 8.71          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 19       | 8.7           |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 15       | 8.7           |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 1        | 8.7           |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 8.69          |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 8.68          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 8.68          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 8.66          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 8.65          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 19       | 8.64          |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 8.63          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 8.63          |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 8.62          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 4        | 8.62          |
| (1,232) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 8.61          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 20       | 8.6           |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 13       | 8.6           |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 8.6           |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 8.6           |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 8.59          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 10       | 8.59          |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 8.59          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 8        | 8.59          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 8.56          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1        | 8.55          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 13       | 8.55          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 8.54          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 8.53          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 8        | 8.53          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 4        | 8.53          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 18       | 8.52          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 14       | 8.5           |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 17       | 8.49          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 8.48          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 8.47          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 8.45          |
| (1,468) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 8.44          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 20       | 8.44          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 8.44          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 18       | 8.44          |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 8.43          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 4        | 8.43          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 2        | 8.41          |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 8.41          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 8.41          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 8.41          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 8.4           |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 9        | 8.4           |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 9        | 8.39          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 8.39          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 8.39          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 8.37          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 5        | 8.37          |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 4        | 8.37          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 7        | 8.37          |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 8.35          |
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 8.35          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 8.34          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 6        | 8.31          |
| (1,213) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 8.3           |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 8.3           |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 8.3           |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 8.28          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 16       | 8.28          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 20       | 8.27          |
| (1,431) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 14       | 8.26          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 8.26          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 10       | 8.26          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 15       | 8.24          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 8.24          |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 8.21          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 3        | 8.21          |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 8.2           |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 8.2           |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 8.2           |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 8.2           |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 4        | 8.18          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 8.18          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 8.18          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 8.15          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 8.15          |
| (1,489) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 8.13          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 17       | 8.12          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 8.12          |
| (1,237) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 16       | 8.12          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 1        | 8.11          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 18       | 8.09          |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 5        | 8.08          |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 19       | 8.07          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 8.06          |
| (1,221) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 8.06          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 8.05          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 13       | 8.04          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 7        | 8.03          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 8.02          |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 9        | 8.02          |
| (1,543) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 3        | 8.01          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 8.01          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 15       | 8.01          |
| (1,437) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 7.99          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 7.99          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 7.99          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 7.99          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 7.98          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 20       | 7.98          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 7.98          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 7        | 7.97          |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 7.95          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 11       | 7.95          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 7.95          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 7.94          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 2        | 7.93          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 12       | 7.93          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 11       | 7.93          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 7.92          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 7.92          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 14       | 7.92          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 7.92          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 7.92          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 7.9           |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 7.9           |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 7.9           |
| (1,117) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 7.89          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 20       | 7.88          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 7.88          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 18       | 7.88          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 7.87          |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 7.86          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 7.86          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 7.86          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 12       | 7.82          |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 18       | 7.82          |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 3        | 7.8           |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 9        | 7.79          |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 7.78          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 7.78          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 7.75          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 7        | 7.74          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 7.74          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 10       | 7.74          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 7.73          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 7.73          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 7.72          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 7.71          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 7.7           |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 7.7           |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 7.7           |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 7.69          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 16       | 7.66          |
| (1,18)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 2        | 7.66          |
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 7.64          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 7.64          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 7.64          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 13       | 7.63          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 7.63          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 7.63          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 7.62          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 7.62          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 8        | 7.61          |
| (1,228) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 7.61          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 19       | 7.6           |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 9        | 7.59          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 7.59          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 15       | 7.58          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 7.58          |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 6        | 7.57          |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 7.56          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 7.56          |
| (1,426) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 7.56          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 6        | 7.56          |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 7.56          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 7.56          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 7.54          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 7.54          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 18       | 7.54          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 7.54          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 6        | 7.53          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 7.53          |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 7.52          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20       | 7.52          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 8        | 7.5           |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 14       | 7.5           |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 7.49          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 7.48          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 18       | 7.47          |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 7.47          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 7.47          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 7.46          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 12       | 7.45          |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 9        | 7.44          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 7.44          |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 2        | 7.43          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 7        | 7.43          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 6        | 7.42          |
| (1,359) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:692:A:LEU:N  | 1:692:A:LEU:H | 6        | 7.41          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 18       | 7.41          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N  | 1:702:A:GLU:H | 13       | 7.4           |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 17       | 7.4           |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 2        | 7.4           |
| (1,419) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 6        | 7.39          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 3        | 7.39          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 14       | 7.39          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 11       | 7.38          |
| (1,526) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 16       | 7.38          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 11       | 7.38          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 17       | 7.38          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 6        | 7.37          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 5        | 7.36          |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:675:A:LEU:N  | 1:675:A:LEU:H | 15       | 7.36          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 13       | 7.36          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 10       | 7.35          |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N  | 1:687:A:GLN:H | 20       | 7.34          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 14       | 7.34          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 9        | 7.34          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 9        | 7.34          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 20       | 7.33          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 17       | 7.31          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 5        | 7.29          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 11       | 7.28          |
| (1,141) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 12       | 7.27          |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:669:A:ALA:N  | 1:669:A:ALA:H | 13       | 7.26          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 19       | 7.25          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 7        | 7.25          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 9        | 7.25          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 10       | 7.24          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 20       | 7.2           |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 2        | 7.19          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:671:A:GLU:N  | 1:671:A:GLU:H | 7        | 7.19          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 15       | 7.19          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 16       | 7.19          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:693:A:TYR:N  | 1:693:A:TYR:H | 14       | 7.19          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 15       | 7.18          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 5        | 7.16          |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 17       | 7.15          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 3        | 7.15          |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 12       | 7.15          |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 17       | 7.14          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 14       | 7.14          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 5        | 7.11          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 19       | 7.11          |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 2        | 7.1           |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 8        | 7.09          |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 7.09          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 7.08          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 7.07          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 7.06          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 7.05          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 7.04          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 14       | 7.03          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 7.02          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 12       | 7.02          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 3        | 7.01          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 6        | 7.0           |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 8        | 6.99          |
| (1,59)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 13       | 6.99          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 6.97          |
| (1,313) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 6.97          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 7        | 6.97          |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 6.96          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 6.95          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 5        | 6.95          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 6.93          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 17       | 6.93          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 6.93          |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1        | 6.91          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 11       | 6.91          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 15       | 6.9           |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 6.89          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 6.89          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 2        | 6.88          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 3        | 6.88          |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 6.87          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 6.87          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 6.87          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 6.87          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 6.86          |
| (1,12)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 6.86          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 6.84          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 6.83          |
| (1,279) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 15       | 6.82          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 6.82          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 6.82          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 19       | 6.81          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 6.81          |
| (1,37)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 6.81          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 17       | 6.8           |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 6.8           |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 6.8           |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 6.79          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 6.79          |
| (1,228) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 17       | 6.78          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1        | 6.77          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 12       | 6.77          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,431) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 11       | 6.76          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 19       | 6.74          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 14       | 6.74          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 6.73          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 9        | 6.73          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 11       | 6.73          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 6.72          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 14       | 6.71          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 6.7           |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 6.7           |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 6.69          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 6.69          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 6.68          |
| (1,183) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 6.67          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 6.66          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 6.66          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 6.65          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 19       | 6.64          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 6.64          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 6.62          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 18       | 6.62          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 10       | 6.62          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 6.62          |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 6        | 6.61          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 5        | 6.6           |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 16       | 6.6           |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 15       | 6.59          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 6.59          |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 6.57          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 13       | 6.57          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 20       | 6.57          |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 4        | 6.56          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 2        | 6.56          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 6.54          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 13       | 6.54          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 6.53          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 6.53          |
| (1,312) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 6.52          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 6.52          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 6.52          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 6.51          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 6.5           |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 8        | 6.5           |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 11       | 6.49          |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 2        | 6.49          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 6.49          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 6.47          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 6.46          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 6.46          |
| (1,302) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 6.45          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 12       | 6.45          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 6.45          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 8        | 6.44          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 6.44          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 6.43          |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 6.43          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 6.43          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 6.43          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 6.43          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 6.42          |
| (1,498) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 6.41          |
| (1,472) | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 6.41          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 6.4           |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 6.38          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 6.37          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 6.37          |
| (1,1)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 8        | 6.37          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 6.35          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 8        | 6.34          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 6.34          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 6.34          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 4        | 6.34          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 8        | 6.34          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 7        | 6.33          |
| (1,279) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 4        | 6.32          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 6.32          |
| (1,339) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 16       | 6.3           |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 6.3           |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 6.3           |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 6.3           |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 6.29          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 6.29          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 6.29          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 6.28          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 6.28          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 13       | 6.28          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 20       | 6.27          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 6.27          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 6.27          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 17       | 6.26          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 6.26          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 6.25          |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 6.24          |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 6.24          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 9        | 6.23          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 6.23          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 6.23          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 6.23          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 6.22          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 6.21          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 6.21          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 6.19          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 3        | 6.19          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 6.18          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 6.17          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 20       | 6.17          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 5        | 6.17          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 18       | 6.16          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 6.16          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 6.16          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 6.15          |
| (1,71)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 14       | 6.15          |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 8        | 6.14          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 6.13          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 18       | 6.13          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 20       | 6.13          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 6.12          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 20       | 6.12          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 6.12          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 8        | 6.09          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 3        | 6.09          |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 8        | 6.09          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 6.09          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 6.09          |
| (1,248) | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 6.08          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 6.08          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 6.07          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 18       | 6.05          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 6.04          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 2        | 6.02          |
| (1,359) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 15       | 6.02          |
| (1,323) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 3        | 6.02          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 6.01          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 6.01          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 9        | 6.0           |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 6.0           |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 9        | 5.99          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 15       | 5.99          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 1        | 5.97          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 15       | 5.97          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 5.96          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 14       | 5.95          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 17       | 5.94          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 5.93          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 5.92          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 19       | 5.92          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 5.91          |
| (1,521) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 12       | 5.91          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 5.91          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 5.91          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 5.89          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 5.89          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 5.89          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 5.88          |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 16       | 5.88          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 5.88          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 12       | 5.88          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 5.88          |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 4        | 5.87          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 3        | 5.86          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 12       | 5.86          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 5.86          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 16       | 5.85          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 2        | 5.84          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 5.84          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 5.83          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 19       | 5.82          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 5.81          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 5.81          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 3        | 5.81          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 5.81          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 5.79          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 5.78          |
| (1,468) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 5.77          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 5.77          |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 2        | 5.77          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 5.77          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 5.76          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 5.75          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 10       | 5.74          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 13       | 5.74          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 4        | 5.74          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 5.73          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 12       | 5.73          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 5.72          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 5.72          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 13       | 5.72          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 13       | 5.7           |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 5.7           |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 5.69          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 6        | 5.69          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 5.69          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 16       | 5.68          |
| (1,412) | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 5.67          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 5.67          |
| (1,298) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 5.67          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 5.67          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 18       | 5.65          |
| (1,430) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 5.63          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 13       | 5.63          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 7        | 5.61          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 5.59          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 11       | 5.59          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 2        | 5.58          |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 5        | 5.57          |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 5.57          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 5.57          |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 5.56          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 5.56          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 8        | 5.55          |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 13       | 5.54          |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1        | 5.54          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 5.54          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 18       | 5.54          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 5.53          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 5.52          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 5.51          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 12       | 5.51          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 4        | 5.51          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 9        | 5.5           |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 5.5           |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 5.49          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 5.49          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 5.48          |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 5.48          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 5.48          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 5.48          |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 7        | 5.47          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 5.47          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 5.47          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 5.47          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 15       | 5.46          |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 5        | 5.44          |
| (2,20)  | 1:662:A:GLU:N | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N | 6        | 5.43          |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 5.43          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 5.43          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 19       | 5.42          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 10       | 5.42          |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 5        | 5.41          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 8        | 5.41          |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 16       | 5.41          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 5.4           |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 11       | 5.4           |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 5.4           |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 5.4           |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 5.39          |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 5.39          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 5.38          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 17       | 5.38          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 5.38          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 5.37          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 8        | 5.36          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 5.35          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 5.35          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 5.34          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 5.32          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 5        | 5.32          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 5.31          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 5.29          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 4        | 5.28          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 16       | 5.28          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 5.28          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 2        | 5.28          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 7        | 5.28          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1        | 5.28          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 16       | 5.27          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 5.27          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 5.27          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 2        | 5.26          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 5.26          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 5.26          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 5.24          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 12       | 5.24          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 6        | 5.24          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 15       | 5.23          |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 5.22          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1        | 5.22          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 11       | 5.21          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 5.21          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 18       | 5.2           |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 5.2           |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 5.19          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 5.18          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 14       | 5.17          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 5.17          |
| (1,184) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1        | 5.17          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 3        | 5.17          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 5.16          |
| (1,283) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 14       | 5.15          |
| (1,211) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 4        | 5.15          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20       | 5.15          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 5.15          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 9        | 5.14          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 5.14          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 5.14          |
| (1,388) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 5.12          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 13       | 5.11          |
| (1,233) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 5.1           |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 19       | 5.1           |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 5.09          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 7        | 5.09          |
| (1,359) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 13       | 5.08          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 15       | 5.08          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 5.08          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 5.08          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 17       | 5.07          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 17       | 5.07          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 17       | 5.07          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 7        | 5.07          |
| (1,142) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:702:A:GLU:N  | 1:702:A:GLU:H | 4        | 5.06          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 3        | 5.06          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 19       | 5.06          |
| (1,97)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 8        | 5.05          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 18       | 5.04          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 6        | 5.03          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 11       | 5.03          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 5        | 5.03          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 5        | 5.03          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 11       | 5.02          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 14       | 5.02          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 14       | 5.02          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 9        | 5.01          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 16       | 5.0           |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 9        | 4.99          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 7        | 4.99          |
| (1,218) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 11       | 4.99          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 14       | 4.98          |
| (1,556) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 1        | 4.97          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 7        | 4.97          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 8        | 4.97          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 6        | 4.96          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 7        | 4.96          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 11       | 4.96          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 11       | 4.95          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 12       | 4.94          |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 3        | 4.93          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 12       | 4.93          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 4        | 4.93          |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 3        | 4.93          |
| (1,492) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 12       | 4.92          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 2        | 4.92          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 3        | 4.91          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 9        | 4.91          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N  | 1:672:A:ALA:H | 20       | 4.9           |
| (1,323) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 8        | 4.9           |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 6        | 4.9           |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 14       | 4.9           |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 8        | 4.9           |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 15       | 4.89          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 17       | 4.89          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C  | 1:723:A:MET:N | 5        | 4.88          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 9        | 4.88          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 14       | 4.86          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 6        | 4.86          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 4        | 4.85          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 13       | 4.85          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 8        | 4.84          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 4.83          |
| (1,464) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H | 6        | 4.82          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 5        | 4.82          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 14       | 4.82          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 4.82          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 13       | 4.81          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 4.8           |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 4        | 4.79          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 19       | 4.79          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 13       | 4.79          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 19       | 4.78          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 19       | 4.77          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 4.77          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 4.77          |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 20       | 4.76          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 4.76          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 4.74          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 4.74          |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 7        | 4.73          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 4.73          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 15       | 4.72          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 4.72          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 14       | 4.71          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 11       | 4.71          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 6        | 4.71          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 5        | 4.7           |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 4.69          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 2        | 4.68          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 4.68          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 4.68          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 17       | 4.68          |
| (1,171) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 4.67          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 1        | 4.67          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 2        | 4.66          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 2        | 4.66          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 4.65          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 4.64          |
| (1,5)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 4.63          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 12       | 4.62          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 10       | 4.62          |
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H | 3        | 4.62          |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 2        | 4.61          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 4.59          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 2        | 4.59          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 4.59          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 8        | 4.58          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 20       | 4.58          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 4.58          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 4.58          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 4.58          |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 6        | 4.57          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 10       | 4.57          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 10       | 4.56          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 20       | 4.56          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 14       | 4.55          |
| (1,228) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 4.54          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 4.54          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 4.54          |
| (1,2)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 13       | 4.54          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 19       | 4.53          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 2        | 4.53          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 2        | 4.52          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 9        | 4.52          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 8        | 4.52          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 14       | 4.51          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 19       | 4.51          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 5        | 4.51          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 8        | 4.5           |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C | 1:641:A:TYR:N | 3        | 4.5           |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 4.5           |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 5        | 4.5           |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 19       | 4.5           |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 10       | 4.49          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 18       | 4.48          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 4.48          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 4.48          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 4.47          |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 4.47          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 17       | 4.47          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 3        | 4.46          |
| (1,520) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 4.44          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 11       | 4.43          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 1        | 4.43          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 18       | 4.42          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 4.42          |
| (1,312) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 6        | 4.41          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 4.41          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 4.4           |
| (1,437) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 17       | 4.39          |
| (1,233) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 4.39          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 15       | 4.39          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 4.39          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 4.39          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 4.38          |
| (1,555) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 6        | 4.37          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 17       | 4.37          |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 6        | 4.36          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 17       | 4.36          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 4.36          |
| (1,193) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 1        | 4.35          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 3        | 4.35          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 3        | 4.34          |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 9        | 4.34          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 2        | 4.33          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 9        | 4.33          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 6        | 4.33          |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 13       | 4.33          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 2        | 4.32          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 13       | 4.3           |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 6        | 4.3           |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 14       | 4.29          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 14       | 4.28          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 19       | 4.27          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 9        | 4.26          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 18       | 4.26          |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 1        | 4.26          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 3        | 4.25          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 17       | 4.25          |
| (1,500) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 1        | 4.24          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 20       | 4.24          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 8        | 4.23          |
| (1,282) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:693:A:TYR:N  | 1:693:A:TYR:H | 16       | 4.23          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 17       | 4.22          |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 11       | 4.22          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 6        | 4.19          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:702:A:GLU:N  | 1:702:A:GLU:H | 11       | 4.18          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 2        | 4.18          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 5        | 4.17          |
| (1,228) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 6        | 4.17          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 13       | 4.17          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 14       | 4.16          |
| (1,83)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 20       | 4.16          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 10       | 4.16          |
| (1,519) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:671:A:GLU:N  | 1:671:A:GLU:H | 1        | 4.15          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 10       | 4.15          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 12       | 4.15          |
| (1,27)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 6        | 4.15          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C  | 1:723:A:MET:N | 11       | 4.12          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 5        | 4.12          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 7        | 4.12          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 5        | 4.1           |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 5        | 4.09          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 8        | 4.09          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 4        | 4.08          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N  | 1:693:A:TYR:H | 17       | 4.07          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 18       | 4.07          |
| (1,267) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 2        | 4.06          |
| (1,123) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 12       | 4.06          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 9        | 4.06          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 13       | 4.04          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 1        | 4.04          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 4        | 4.04          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 10       | 4.03          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 14       | 4.03          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 19       | 4.02          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 12       | 4.02          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 2        | 4.02          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 8        | 4.01          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 6        | 3.99          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 16       | 3.98          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 5        | 3.97          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 17       | 3.95          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 17       | 3.95          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 3        | 3.94          |
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 7        | 3.93          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 4        | 3.93          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 18       | 3.93          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 18       | 3.92          |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 12       | 3.92          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 16       | 3.91          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:672:A:ALA:N  | 1:672:A:ALA:H | 3        | 3.9           |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 5        | 3.9           |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 10       | 3.89          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 13       | 3.89          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 6        | 3.88          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 8        | 3.88          |
| (1,493) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 17       | 3.87          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 16       | 3.87          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 3        | 3.84          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 12       | 3.84          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 18       | 3.83          |
| (1,527) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 12       | 3.83          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 18       | 3.83          |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 11       | 3.83          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 6        | 3.83          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 8        | 3.83          |
| (1,488) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 1        | 3.82          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 7        | 3.82          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 12       | 3.82          |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 15       | 3.81          |
| (1,431) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 18       | 3.81          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 13       | 3.81          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 6        | 3.8           |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 17       | 3.8           |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 1        | 3.79          |
| (1,539) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 17       | 3.79          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 10       | 3.79          |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 17       | 3.78          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 12       | 3.77          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 17       | 3.75          |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H | 1:702:A:GLU:N  | 1:702:A:GLU:H | 14       | 3.75          |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 15       | 3.75          |
| (1,178) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 16       | 3.75          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 14       | 3.75          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 15       | 3.74          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 12       | 3.73          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 2        | 3.72          |
| (1,87)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 14       | 3.72          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 5        | 3.71          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 3.7           |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 9        | 3.7           |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 16       | 3.7           |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 3.68          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 3.68          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 3.68          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 19       | 3.67          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 4        | 3.67          |
| (1,100) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 10       | 3.67          |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 15       | 3.66          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 5        | 3.65          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 11       | 3.64          |
| (1,96)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 3.63          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 3.62          |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 3.62          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 3.62          |
| (1,521) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 3.61          |
| (1,482) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 10       | 3.61          |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 6        | 3.61          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 5        | 3.61          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 3.6           |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 10       | 3.6           |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 20       | 3.59          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 6        | 3.59          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 3.59          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 10       | 3.59          |
| (1,88)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 3.59          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 6        | 3.58          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 17       | 3.58          |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 6        | 3.58          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 3        | 3.58          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 9        | 3.57          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 14       | 3.56          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 19       | 3.55          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 3.55          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 5        | 3.54          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 20       | 3.54          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 3.54          |
| (1,9)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 3.53          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 13       | 3.51          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 20       | 3.5           |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 9        | 3.5           |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 12       | 3.5           |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 10       | 3.5           |
| (1,99)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 3.5           |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 3.5           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 12       | 3.49          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 19       | 3.49          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 13       | 3.49          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 4        | 3.49          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 20       | 3.49          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 18       | 3.49          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 4        | 3.48          |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 4        | 3.48          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 16       | 3.48          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 9        | 3.47          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 14       | 3.47          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 9        | 3.47          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N  | 1:693:A:TYR:H | 1        | 3.46          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 15       | 3.46          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 8        | 3.45          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 13       | 3.45          |
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 6        | 3.44          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 12       | 3.43          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 9        | 3.42          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 2        | 3.41          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 17       | 3.41          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 11       | 3.41          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 18       | 3.41          |
| (1,197) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 1        | 3.4           |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 17       | 3.39          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N  | 1:693:A:TYR:H | 18       | 3.39          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 11       | 3.39          |
| (1,152) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 4        | 3.38          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 3        | 3.38          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 4        | 3.37          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 3        | 3.36          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 7        | 3.36          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 9        | 3.36          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 15       | 3.36          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 10       | 3.35          |
| (1,230) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 6        | 3.35          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 7        | 3.34          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 6        | 3.34          |
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 16       | 3.34          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 9        | 3.34          |
| (2,20)  | 1:662:A:GLU:N | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C  | 1:663:A:PRO:N | 16       | 3.33          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 16       | 3.33          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 20       | 3.33          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 11       | 3.33          |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 15       | 3.31          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 7        | 3.31          |
| (1,437) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 14       | 3.3           |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 15       | 3.29          |
| (1,76)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 20       | 3.29          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 6        | 3.28          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 11       | 3.28          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H | 7        | 3.27          |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 12       | 3.27          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 18       | 3.27          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 2        | 3.26          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 1        | 3.26          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 13       | 3.25          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 17       | 3.25          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 3.25          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 7        | 3.24          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 18       | 3.24          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 4        | 3.23          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 16       | 3.23          |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 3.23          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 20       | 3.23          |
| (1,15)  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 3.23          |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C | 1:641:A:TYR:N | 16       | 3.22          |
| (1,334) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 19       | 3.22          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 1        | 3.22          |
| (1,32)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 3.22          |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 2        | 3.22          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 7        | 3.21          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 4        | 3.21          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 10       | 3.21          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 13       | 3.2           |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 15       | 3.2           |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 10       | 3.2           |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 12       | 3.19          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 16       | 3.19          |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 3.18          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H | 13       | 3.17          |
| (1,233) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 11       | 3.16          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 14       | 3.16          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 6        | 3.15          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 6        | 3.14          |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 9        | 3.14          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 3.13          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 9        | 3.12          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 7        | 3.12          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 10       | 3.12          |
| (1,559) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 16       | 3.11          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 3.1           |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 15       | 3.1           |
| (1,26)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 3.1           |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 7        | 3.1           |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 4        | 3.09          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 14       | 3.09          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 19       | 3.09          |
| (1,250) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 4        | 3.08          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 3.08          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 10       | 3.06          |
| (1,359) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H | 9        | 3.06          |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,172) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:675:A:LEU:N  | 1:675:A:LEU:H | 7        | 3.06          |
| (1,163) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 1        | 3.06          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 5        | 3.06          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 18       | 3.05          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 12       | 3.04          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 15       | 3.03          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 5        | 3.02          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 17       | 3.02          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N  | 1:693:A:TYR:H | 19       | 3.01          |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 9        | 3.01          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 9        | 3.01          |
| (1,279) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 17       | 3.0           |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 2        | 3.0           |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 4        | 2.99          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 5        | 2.99          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 6        | 2.98          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 20       | 2.98          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 8        | 2.97          |
| (1,555) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 7        | 2.97          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 15       | 2.97          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 10       | 2.97          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 6        | 2.97          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 15       | 2.96          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 2        | 2.96          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 8        | 2.95          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 14       | 2.95          |
| (1,98)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 2        | 2.94          |
| (1,233) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 16       | 2.93          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 9        | 2.93          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 3        | 2.93          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 18       | 2.91          |
| (1,558) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 13       | 2.91          |
| (1,540) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 20       | 2.91          |
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 4        | 2.91          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 12       | 2.91          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 12       | 2.91          |
| (1,36)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 2        | 2.91          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 10       | 2.9           |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 10       | 2.9           |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 13       | 2.89          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 16       | 2.88          |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C  | 1:641:A:TYR:N | 18       | 2.87          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 7        | 2.87          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 2        | 2.87          |
| (2,19)  | 1:661:A:ASP:C | 1:662:A:GLU:N  | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C | 6        | 2.86          |
| (1,163) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 8        | 2.86          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 8        | 2.86          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 13       | 2.86          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 3        | 2.86          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 16       | 2.85          |
| (1,520) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 12       | 2.85          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 3        | 2.85          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 16       | 2.85          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 11       | 2.85          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 5        | 2.84          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 19       | 2.84          |
| (1,42)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 6        | 2.84          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 2.83          |
| (1,118) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H | 1        | 2.82          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 2        | 2.82          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 2.8           |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H | 9        | 2.79          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 5        | 2.79          |
| (1,99)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 7        | 2.79          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 3        | 2.79          |
| (2,20)  | 1:662:A:GLU:N | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N | 12       | 2.78          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 2.78          |
| (1,46)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 2.78          |
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 15       | 2.77          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 9        | 2.77          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 2.76          |
| (1,521) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 4        | 2.76          |
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 6        | 2.76          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 2.76          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 2.76          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 16       | 2.76          |
| (1,438) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 11       | 2.75          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 3        | 2.75          |
| (1,306) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 5        | 2.75          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 1        | 2.74          |
| (1,520) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 2        | 2.73          |
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 7        | 2.73          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 18       | 2.73          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 8        | 2.73          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 1        | 2.73          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H | 20       | 2.72          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 2        | 2.72          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 16       | 2.71          |
| (1,228) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 10       | 2.71          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 3        | 2.71          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 6        | 2.7           |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:H | 7        | 2.69          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 13       | 2.69          |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 17       | 2.68          |
| (1,345) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 2.68          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H | 4        | 2.68          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 6        | 2.67          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 18       | 2.66          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 13       | 2.65          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 6        | 2.65          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 11       | 2.65          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 5        | 2.64          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 8        | 2.63          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 1        | 2.63          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 16       | 2.62          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 13       | 2.62          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 20       | 2.62          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 14       | 2.61          |
| (1,99)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 5        | 2.61          |
| (2,20)  | 1:662:A:GLU:N | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C  | 1:663:A:PRO:N | 18       | 2.6           |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 11       | 2.6           |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 7        | 2.6           |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 18       | 2.6           |
| (1,99)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 9        | 2.6           |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 18       | 2.59          |
| (1,233) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 3        | 2.59          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 20       | 2.59          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 11       | 2.59          |
| (1,349) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 8        | 2.58          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 9        | 2.58          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 3        | 2.58          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 9        | 2.58          |
| (1,529) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 2        | 2.57          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 17       | 2.57          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 8        | 2.56          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 20       | 2.56          |
| (1,539) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 9        | 2.55          |
| (1,539) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 12       | 2.55          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 15       | 2.55          |
| (1,371) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 11       | 2.55          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 17       | 2.55          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 14       | 2.55          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 4        | 2.54          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 20       | 2.54          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 5        | 2.54          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 14       | 2.54          |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 17       | 2.54          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 10       | 2.53          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 4        | 2.53          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 1        | 2.52          |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 7        | 2.52          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 7        | 2.52          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 15       | 2.52          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 9        | 2.51          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 8        | 2.5           |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 5        | 2.5           |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 19       | 2.5           |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 11       | 2.49          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 18       | 2.49          |
| (1,441) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 17       | 2.48          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 9        | 2.47          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 18       | 2.47          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 6        | 2.47          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 16       | 2.46          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N | 3        | 2.46          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 1        | 2.46          |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 8        | 2.46          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 11       | 2.45          |
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N | 1:719:A:ALA:H | 20       | 2.44          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 8        | 2.44          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 14       | 2.44          |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 18       | 2.44          |
| (2,6)   | 1:634:A:TRP:N | 1:634:A:TRP:CA | 1:634:A:TRP:C | 1:635:A:LEU:N | 16       | 2.42          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H | 6        | 2.42          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 12       | 2.42          |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 9        | 2.42          |
| (1,99)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 12       | 2.42          |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 20       | 2.42          |
| (1,563) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 2.41          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H | 12       | 2.4           |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 15       | 2.4           |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 19       | 2.4           |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H | 20       | 2.4           |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 15       | 2.4           |
| (1,8)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 4        | 2.4           |
| (1,478) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H | 5        | 2.38          |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H | 13       | 2.38          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 19       | 2.38          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 7        | 2.38          |
| (1,547) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 10       | 2.37          |
| (1,493) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 12       | 2.37          |
| (1,272) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 1        | 2.37          |
| (1,440) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 14       | 2.36          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 11       | 2.36          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 11       | 2.36          |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 2.35          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C | 1:723:A:MET:N | 9        | 2.34          |
| (1,163) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 6        | 2.34          |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C | 1:641:A:TYR:N | 2        | 2.33          |
| (1,475) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 18       | 2.33          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N | 1:717:A:GLU:H | 7        | 2.33          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 8        | 2.33          |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H | 5        | 2.33          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 15       | 2.33          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 6        | 2.33          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N | 1:712:A:TYR:H | 3        | 2.32          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H | 14       | 2.31          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N | 1:721:A:ALA:H | 3        | 2.3           |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H | 12       | 2.3           |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H | 18       | 2.29          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 10       | 2.28          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H | 11       | 2.28          |
| (1,362) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:715:A:LYS:N | 1:715:A:LYS:H | 2        | 2.27          |
| (1,350) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 1        | 2.27          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 13       | 2.25          |
| (1,133) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 5        | 2.25          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 16       | 2.25          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 2        | 2.25          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 5        | 2.24          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 3        | 2.24          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 7        | 2.24          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 18       | 2.23          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 9        | 2.23          |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 3        | 2.23          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 3        | 2.23          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 16       | 2.23          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 14       | 2.23          |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 11       | 2.22          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 2        | 2.22          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 12       | 2.22          |
| (2,6)   | 1:634:A:TRP:N | 1:634:A:TRP:CA | 1:634:A:TRP:C  | 1:635:A:LEU:N | 6        | 2.21          |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 6        | 2.21          |
| (1,213) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 15       | 2.21          |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 13       | 2.21          |
| (1,517) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 1        | 2.2           |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 20       | 2.19          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 2        | 2.17          |
| (1,410) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 13       | 2.16          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 18       | 2.16          |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 3        | 2.16          |
| (1,258) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 20       | 2.15          |
| (1,321) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 14       | 2.14          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 10       | 2.14          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 3        | 2.14          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 4        | 2.13          |
| (1,41)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 18       | 2.13          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 16       | 2.12          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 9        | 2.11          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 9        | 2.11          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 16       | 2.11          |
| (1,535) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 17       | 2.1           |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 5        | 2.1           |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 9        | 2.1           |
| (2,51)  | 1:681:A:GLY:C | 1:682:A:LEU:N  | 1:682:A:LEU:CA | 1:682:A:LEU:C | 14       | 2.09          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 1        | 2.09          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 12       | 2.09          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 10       | 2.09          |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 7        | 2.09          |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 20       | 2.06          |
| (1,398) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 8        | 2.06          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 9        | 2.05          |
| (1,493) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 15       | 2.05          |
| (1,199) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 17       | 2.05          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 6        | 2.03          |
| (1,33)  | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 12       | 2.03          |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,2)   | 1:629:A:ASP:N | 1:629:A:ASP:CA | 1:629:A:ASP:C  | 1:630:A:ARG:N | 20       | 2.01          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 18       | 2.01          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 7        | 2.01          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 7        | 2.0           |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 11       | 2.0           |
| (2,20)  | 1:662:A:GLU:N | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C  | 1:663:A:PRO:N | 4        | 2.0           |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 4        | 2.0           |
| (1,323) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 13       | 2.0           |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 12       | 2.0           |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 1        | 2.0           |
| (1,11)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 4        | 2.0           |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 11       | 2.0           |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C  | 1:723:A:MET:N | 3        | 1.99          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 16       | 1.99          |
| (1,337) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 18       | 1.99          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 20       | 1.99          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 16       | 1.99          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 16       | 1.99          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 7        | 1.98          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 1        | 1.97          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 18       | 1.97          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 15       | 1.96          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 1        | 1.95          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 15       | 1.95          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 19       | 1.94          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 3        | 1.94          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 13       | 1.94          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 8        | 1.94          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 6        | 1.94          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 18       | 1.93          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 17       | 1.93          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 17       | 1.93          |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 10       | 1.92          |
| (1,406) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 17       | 1.91          |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 12       | 1.91          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 9        | 1.9           |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 12       | 1.89          |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C  | 1:641:A:TYR:N | 12       | 1.88          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 19       | 1.88          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 5        | 1.88          |
| (1,521) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 15       | 1.87          |
| (1,514) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 12       | 1.87          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 19       | 1.87          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 1        | 1.86          |
| (1,146) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 1        | 1.86          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 2        | 1.86          |
| (2,14)  | 1:638:A:LEU:N | 1:638:A:LEU:CA | 1:638:A:LEU:C  | 1:639:A:HIS:N | 6        | 1.85          |
| (1,333) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:693:A:TYR:N  | 1:693:A:TYR:H | 7        | 1.85          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 13       | 1.85          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 15       | 1.84          |
| (1,270) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 9        | 1.84          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 6        | 1.83          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 12       | 1.82          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 7        | 1.81          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 16       | 1.81          |
| (1,163) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 9        | 1.81          |
| (1,99)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 13       | 1.81          |
| (1,514) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 4        | 1.8           |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 12       | 1.8           |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 10       | 1.79          |
| (1,300) | 1:675:A:LEU:N | 1:675:A:LEU:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 9        | 1.79          |
| (1,64)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 16       | 1.79          |
| (2,14)  | 1:638:A:LEU:N | 1:638:A:LEU:CA | 1:638:A:LEU:C  | 1:639:A:HIS:N | 14       | 1.78          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 14       | 1.77          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 8        | 1.77          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 15       | 1.76          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 8        | 1.76          |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 15       | 1.76          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 6        | 1.76          |
| (2,118) | 1:722:A:GLN:N | 1:722:A:GLN:CA | 1:722:A:GLN:C  | 1:723:A:MET:N | 4        | 1.75          |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C  | 1:641:A:TYR:N | 15       | 1.75          |
| (1,514) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 10       | 1.75          |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 9        | 1.75          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 13       | 1.75          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 9        | 1.75          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 12       | 1.75          |
| (1,513) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 11       | 1.74          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 2        | 1.74          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 19       | 1.74          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 19       | 1.73          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 10       | 1.73          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 16       | 1.73          |
| (1,443) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:672:A:ALA:N  | 1:672:A:ALA:H | 1        | 1.72          |
| (1,405) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 16       | 1.71          |
| (1,273) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 4        | 1.7           |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 11       | 1.7           |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 12       | 1.68          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 9        | 1.68          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 8        | 1.67          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 8        | 1.66          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 19       | 1.65          |
| (1,189) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 18       | 1.65          |
| (1,125) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 16       | 1.65          |
| (2,20)  | 1:662:A:GLU:N | 1:662:A:GLU:CA | 1:662:A:GLU:C  | 1:663:A:PRO:N | 8        | 1.64          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 12       | 1.63          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 15       | 1.63          |
| (1,490) | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 4        | 1.62          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 3        | 1.62          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 6        | 1.61          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 4        | 1.61          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 9        | 1.61          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 13       | 1.61          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 7        | 1.59          |
| (1,359) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:692:A:LEU:N  | 1:692:A:LEU:H | 19       | 1.57          |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 16       | 1.56          |
| (1,343) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 1        | 1.56          |
| (1,323) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 10       | 1.56          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 19       | 1.56          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 2        | 1.56          |
| (1,198) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 14       | 1.56          |
| (1,26)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 2        | 1.56          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 11       | 1.55          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 13       | 1.55          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 8        | 1.55          |
| (1,558) | 1:671:A:GLU:N | 1:671:A:GLU:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 8        | 1.54          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 1        | 1.54          |
| (1,473) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 16       | 1.53          |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 9        | 1.53          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 9        | 1.53          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 7        | 1.53          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 12       | 1.53          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 19       | 1.53          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 15       | 1.52          |
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 10       | 1.52          |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 19       | 1.52          |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 14       | 1.51          |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C  | 1:641:A:TYR:N | 13       | 1.5           |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 4        | 1.5           |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 4        | 1.5           |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 16       | 1.49          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 11       | 1.49          |
| (1,13)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 1        | 1.49          |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 11       | 1.48          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 12       | 1.48          |
| (1,57)  | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 19       | 1.47          |
| (2,51)  | 1:681:A:GLY:C | 1:682:A:LEU:N  | 1:682:A:LEU:CA | 1:682:A:LEU:C | 10       | 1.46          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 7        | 1.46          |
| (1,163) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 4        | 1.46          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 1        | 1.45          |
| (1,385) | 1:709:A:ALA:N | 1:709:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 3        | 1.45          |
| (1,98)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 14       | 1.45          |
| (1,432) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 14       | 1.44          |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 20       | 1.43          |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 13       | 1.43          |
| (1,255) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 4        | 1.43          |
| (1,192) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 19       | 1.42          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 10       | 1.41          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 4        | 1.41          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 16       | 1.4           |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 20       | 1.4           |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 19       | 1.39          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 11       | 1.39          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 1        | 1.39          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,56)  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:CA | 1:687:A:GLN:C  | 1:688:A:ARG:N | 1        | 1.38          |
| (2,56)  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:CA | 1:687:A:GLN:C  | 1:688:A:ARG:N | 7        | 1.38          |
| (1,556) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 8        | 1.38          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 9        | 1.38          |
| (1,493) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 9        | 1.38          |
| (2,22)  | 1:663:A:PRO:N | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C  | 1:664:A:ARG:N | 20       | 1.37          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 13       | 1.37          |
| (1,209) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 6        | 1.37          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 12       | 1.36          |
| (2,21)  | 1:662:A:GLU:C | 1:663:A:PRO:N  | 1:663:A:PRO:CA | 1:663:A:PRO:C | 13       | 1.35          |
| (1,390) | 1:713:A:TYR:N | 1:713:A:TYR:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 6        | 1.34          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 16       | 1.34          |
| (1,126) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 6        | 1.34          |
| (1,26)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 12       | 1.34          |
| (1,493) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 2        | 1.33          |
| (1,131) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 5        | 1.33          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 14       | 1.33          |
| (1,485) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 13       | 1.32          |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 2        | 1.32          |
| (1,512) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:689:A:SER:N  | 1:689:A:SER:H | 20       | 1.31          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 8        | 1.31          |
| (1,202) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:669:A:ALA:N  | 1:669:A:ALA:H | 14       | 1.31          |
| (1,35)  | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 16       | 1.31          |
| (2,56)  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:CA | 1:687:A:GLN:C  | 1:688:A:ARG:N | 2        | 1.3           |
| (1,335) | 1:670:A:ARG:N | 1:670:A:ARG:H  | 1:677:A:THR:N  | 1:677:A:THR:H | 19       | 1.3           |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 14       | 1.3           |
| (2,56)  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:CA | 1:687:A:GLN:C  | 1:688:A:ARG:N | 19       | 1.29          |
| (2,2)   | 1:629:A:ASP:N | 1:629:A:ASP:CA | 1:629:A:ASP:C  | 1:630:A:ARG:N | 15       | 1.29          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 9        | 1.28          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 3        | 1.28          |
| (2,2)   | 1:629:A:ASP:N | 1:629:A:ASP:CA | 1:629:A:ASP:C  | 1:630:A:ARG:N | 13       | 1.27          |
| (1,551) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 13       | 1.27          |
| (1,539) | 1:692:A:LEU:N | 1:692:A:LEU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 4        | 1.27          |
| (1,357) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 12       | 1.27          |
| (1,153) | 1:691:A:ASP:N | 1:691:A:ASP:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 12       | 1.27          |
| (1,378) | 1:708:A:LEU:N | 1:708:A:LEU:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 11       | 1.26          |
| (1,209) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 14       | 1.26          |
| (1,321) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 8        | 1.25          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 5        | 1.25          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 4        | 1.25          |
| (1,553) | 1:667:A:MET:N | 1:667:A:MET:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 18       | 1.24          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 17       | 1.24          |
| (1,301) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 14       | 1.24          |
| (1,207) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 4        | 1.24          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 10       | 1.24          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N  | 1:720:A:TRP:H | 20       | 1.23          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 19       | 1.23          |
| (1,186) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 2        | 1.23          |
| (1,161) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:690:A:GLY:N  | 1:690:A:GLY:H | 18       | 1.23          |
| (1,127) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 7        | 1.23          |
| (1,287) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 4        | 1.22          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,22)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 5        | 1.22          |
| (1,4)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 9        | 1.22          |
| (1,178) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 4        | 1.2           |
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C  | 1:641:A:TYR:N | 11       | 1.19          |
| (1,393) | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 4        | 1.19          |
| (1,26)  | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 15       | 1.19          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 1        | 1.18          |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 18       | 1.18          |
| (2,14)  | 1:638:A:LEU:N | 1:638:A:LEU:CA | 1:638:A:LEU:C  | 1:639:A:HIS:N | 19       | 1.17          |
| (1,552) | 1:672:A:ALA:N | 1:672:A:ALA:H  | 1:696:A:ALA:N  | 1:696:A:ALA:H | 15       | 1.17          |
| (1,401) | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 3        | 1.17          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 14       | 1.17          |
| (1,84)  | 1:697:A:ALA:N | 1:697:A:ALA:H  | 1:703:A:ALA:N  | 1:703:A:ALA:H | 14       | 1.17          |
| (1,414) | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:713:A:TYR:N  | 1:713:A:TYR:H | 9        | 1.16          |
| (1,334) | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:H  | 1:710:A:ASN:N  | 1:710:A:ASN:H | 4        | 1.16          |
| (1,80)  | 1:689:A:SER:N | 1:689:A:SER:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 15       | 1.15          |
| (1,43)  | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 15       | 1.15          |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 2        | 1.14          |
| (1,294) | 1:674:A:MET:N | 1:674:A:MET:H  | 1:701:A:MET:N  | 1:701:A:MET:H | 16       | 1.14          |
| (1,94)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:694:A:THR:N  | 1:694:A:THR:H | 4        | 1.14          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 7        | 1.13          |
| (1,206) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 10       | 1.13          |
| (1,14)  | 1:700:A:ALA:N | 1:700:A:ALA:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 19       | 1.12          |
| (1,264) | 1:710:A:ASN:N | 1:710:A:ASN:H  | 1:717:A:GLU:N  | 1:717:A:GLU:H | 1        | 1.11          |
| (1,233) | 1:701:A:MET:N | 1:701:A:MET:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 5        | 1.11          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 17       | 1.11          |
| (1,52)  | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:708:A:LEU:N  | 1:708:A:LEU:H | 2        | 1.11          |
| (1,6)   | 1:690:A:GLY:N | 1:690:A:GLY:H  | 1:697:A:ALA:N  | 1:697:A:ALA:H | 1        | 1.11          |
| (1,86)  | 1:703:A:ALA:N | 1:703:A:ALA:H  | 1:711:A:GLN:N  | 1:711:A:GLN:H | 16       | 1.1           |
| (1,536) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 6        | 1.09          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 4        | 1.09          |
| (2,56)  | 1:687:A:GLN:N | 1:687:A:GLN:CA | 1:687:A:GLN:C  | 1:688:A:ARG:N | 18       | 1.08          |
| (1,209) | 1:693:A:TYR:N | 1:693:A:TYR:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 20       | 1.08          |
| (1,514) | 1:688:A:ARG:N | 1:688:A:ARG:H  | 1:719:A:ALA:N  | 1:719:A:ALA:H | 6        | 1.07          |
| (1,329) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:698:A:GLU:N  | 1:698:A:GLU:H | 4        | 1.05          |
| (1,223) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:712:A:TYR:N  | 1:712:A:TYR:H | 19       | 1.05          |
| (2,48)  | 1:676:A:PHE:N | 1:676:A:PHE:CA | 1:676:A:PHE:C  | 1:677:A:THR:N | 11       | 1.04          |
| (1,497) | 1:698:A:GLU:N | 1:698:A:GLU:H  | 1:716:A:ALA:N  | 1:716:A:ALA:H | 7        | 1.04          |
| (1,363) | 1:699:A:ALA:N | 1:699:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 13       | 1.04          |
| (1,178) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 5        | 1.04          |
| (2,23)  | 1:663:A:PRO:C | 1:664:A:ARG:N  | 1:664:A:ARG:CA | 1:664:A:ARG:C | 4        | 1.03          |
| (2,14)  | 1:638:A:LEU:N | 1:638:A:LEU:CA | 1:638:A:LEU:C  | 1:639:A:HIS:N | 5        | 1.03          |
| (1,351) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:709:A:ALA:N  | 1:709:A:ALA:H | 11       | 1.03          |
| (2,45)  | 1:674:A:MET:C | 1:675:A:LEU:N  | 1:675:A:LEU:CA | 1:675:A:LEU:C | 18       | 1.02          |
| (2,5)   | 1:633:A:ASP:C | 1:634:A:TRP:N  | 1:634:A:TRP:CA | 1:634:A:TRP:C | 9        | 1.02          |
| (2,2)   | 1:629:A:ASP:N | 1:629:A:ASP:CA | 1:629:A:ASP:C  | 1:630:A:ARG:N | 17       | 1.02          |
| (1,323) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:722:A:GLN:N  | 1:722:A:GLN:H | 15       | 1.02          |
| (1,178) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:715:A:LYS:N  | 1:715:A:LYS:H | 2        | 1.02          |
| (1,159) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:721:A:ALA:N  | 1:721:A:ALA:H | 17       | 1.02          |
| (1,3)   | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:700:A:ALA:N  | 1:700:A:ALA:H | 5        | 1.02          |
| (2,52)  | 1:682:A:LEU:N | 1:682:A:LEU:CA | 1:682:A:LEU:C  | 1:683:A:GLU:N | 11       | 1.01          |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (2,18)  | 1:640:A:TRP:N | 1:640:A:TRP:CA | 1:640:A:TRP:C | 1:641:A:TYR:N | 20       | 1.01          |
| (1,564) | 1:695:A:GLN:N | 1:695:A:GLN:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 8        | 1.01          |
| (1,146) | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 12       | 1.01          |
| (1,493) | 1:696:A:ALA:N | 1:696:A:ALA:H  | 1:716:A:ALA:N | 1:716:A:ALA:H | 4        | 1.0           |
| (1,348) | 1:677:A:THR:N | 1:677:A:THR:H  | 1:702:A:GLU:N | 1:702:A:GLU:H | 5        | 1.0           |
| (1,106) | 1:669:A:ALA:N | 1:669:A:ALA:H  | 1:720:A:TRP:N | 1:720:A:TRP:H | 17       | 1.0           |
| (1,98)  | 1:694:A:THR:N | 1:694:A:THR:H  | 1:711:A:GLN:N | 1:711:A:GLN:H | 1        | 1.0           |