



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 11:21 AM UTC

PDB ID : 2N1B / pdb\_00002n1b  
BMRB ID : 25554  
Title : NMR solution structure of nucleotide-free Ran GTPase  
Authors : Bacot-Davis, V.R.; Palmenberg, A.C.  
Deposited on : 2015-03-26

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

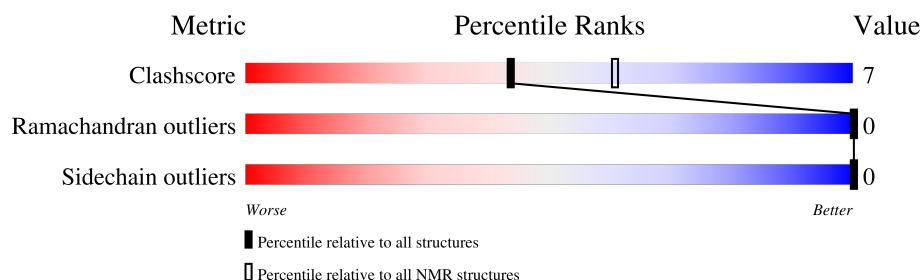
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 83%.

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     | 261    |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:5-A:216 (212)       | 0.04              | 2            |

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

| Cluster number        | Models        |
|-----------------------|---------------|
| 1                     | 1, 2, 4, 7, 8 |
| 2                     | 3, 5, 9, 10   |
| Single-model clusters | 6             |

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3447 atoms, of which 1724 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called GTP-binding nuclear protein Ran.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |      |      |     |     |   | Trace |
|-----|-------|----------|-------|------|------|-----|-----|---|-------|
| 1   | A     | 216      | Total | C    | H    | N   | O   | S | 0     |
|     |       |          | 3447  | 1109 | 1724 | 295 | 312 | 7 |       |

There are 45 discrepancies between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment        | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A     | -40     | MET      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -39     | ARG      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -38     | GLY      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -37     | SER      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -36     | HIS      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -35     | HIS      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -34     | HIS      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -33     | HIS      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -32     | HIS      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -31     | HIS      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -30     | GLY      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -29     | MET      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -28     | ALA      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -27     | SER      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -26     | MET      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -25     | THR      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -24     | GLY      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -23     | GLY      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -22     | GLN      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -21     | GLN      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -20     | MET      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -19     | GLY      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -18     | ARG      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -17     | ASP      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -16     | LEU      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -15     | TYR      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -14     | ASP      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -13     | ASP      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -12     | ASP      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -11     | ASP      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -10     | LYS      | -      | expression tag | UNP P62826 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

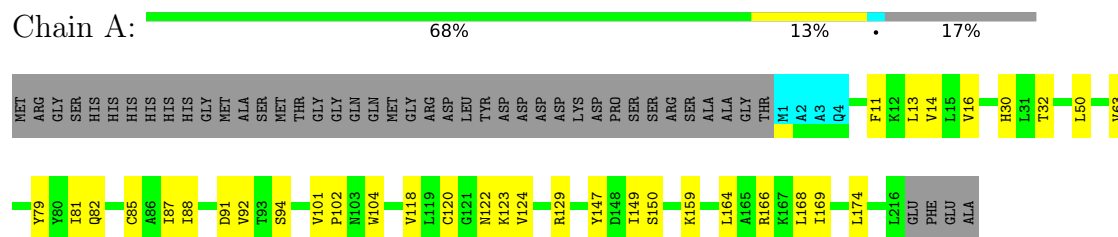
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment        | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A     | -9      | ASP      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -8      | PRO      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -7      | SER      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -6      | SER      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -5      | ARG      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -4      | SER      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -3      | ALA      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -2      | ALA      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | -1      | GLY      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | 0       | THR      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | 217     | GLU      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | 218     | PHE      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | 219     | GLU      | -      | expression tag | UNP P62826 |
| A     | 220     | ALA      | -      | expression tag | UNP P62826 |

## 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: GTP-binding nuclear protein Ran

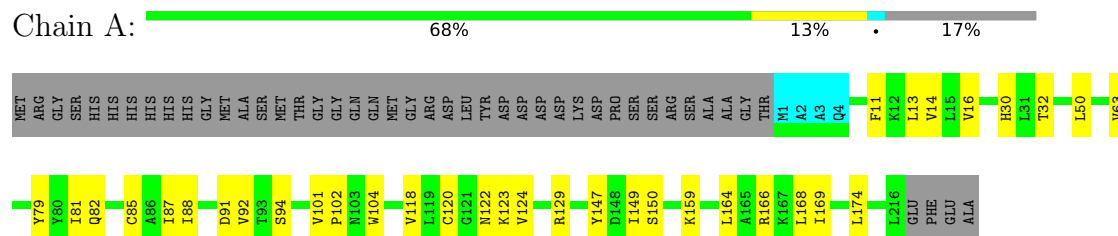


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: GTP-binding nuclear protein Ran

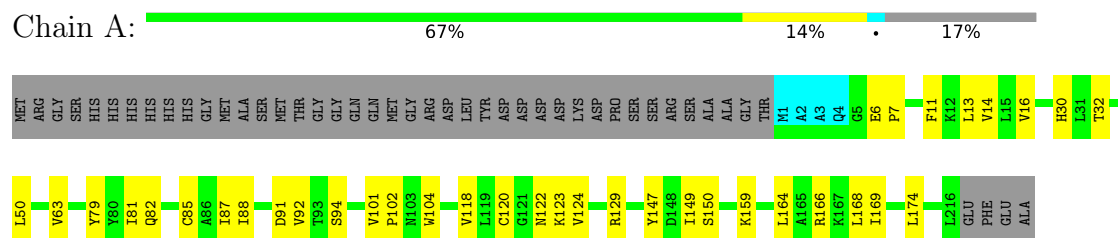


#### 4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: GTP-binding nuclear protein Ran

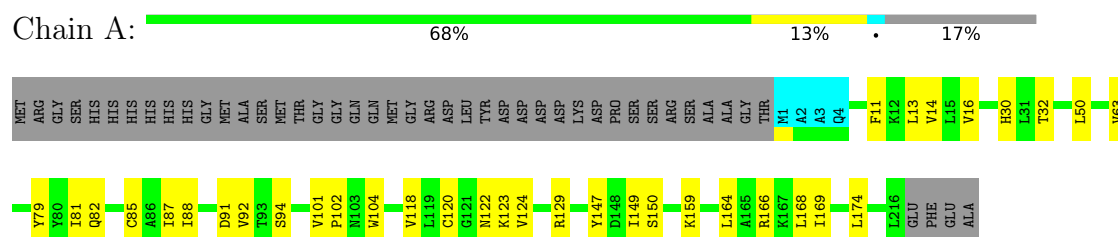






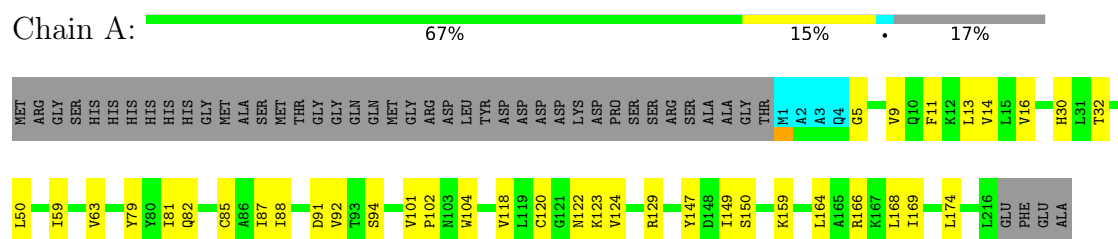
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: GTP-binding nuclear protein Ran



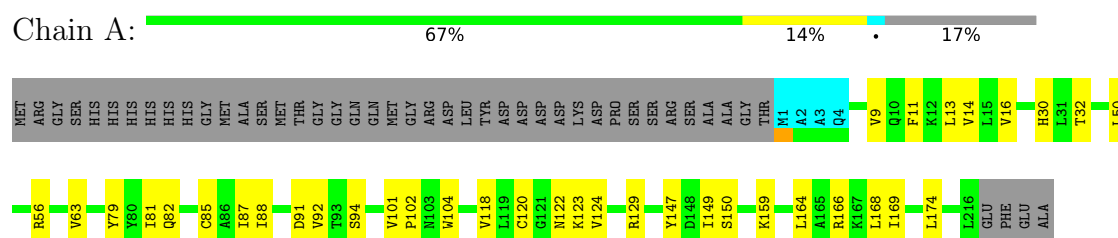
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: GTP-binding nuclear protein Ran



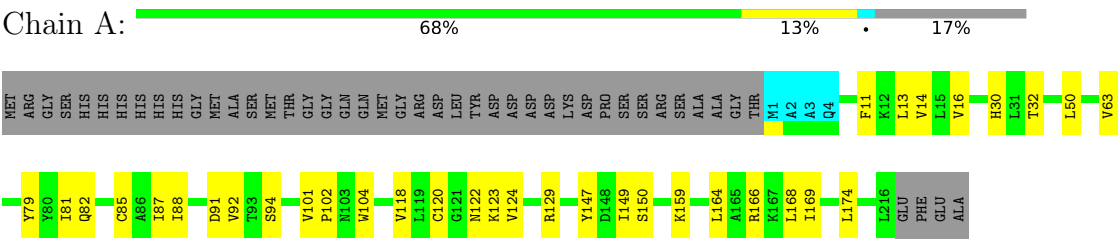
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: GTP-binding nuclear protein Ran



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: GTP-binding nuclear protein Ran



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 50 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|----------------|---------|
| CYANA         | 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                       | 2589           |
| Number of shifts mapped to atoms             | 2584           |
| Number of unparsed shifts                    | 0              |
| Number of shifts with mapping errors         | 5              |
| Number of shifts with mapping warnings       | 0              |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 83%            |

## 6 Model quality [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

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

| Mol | Chain | Bond lengths |                       | Bond angles |                       |
|-----|-------|--------------|-----------------------|-------------|-----------------------|
|     |       | RMSZ         | #Z>5                  | RMSZ        | #Z>5                  |
| 1   | A     | 0.26±0.01    | 0±0/1738 ( 0.0± 0.0%) | 0.65±0.01   | 0±1/2358 ( 0.0± 0.0%) |
| All | All   | 0.26         | 0/17380 ( 0.0%)       | 0.65        | 4/23580 ( 0.0%)       |

There are no bond-length outliers.

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms  | Z    | Observed(°) | Ideal(°) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|--------|------|-------------|----------|--------|-------|
|     |       |     |      |        |      |             |          | Worst  | Total |
| 1   | A     | 5   | GLY  | CA-C-N | 7.01 | 131.33      | 120.68   | 4      | 2     |
| 1   | A     | 5   | GLY  | C-N-CA | 7.01 | 131.33      | 120.68   | 4      | 2     |

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     | 1696  | 1697     | 1696     | 22±0    |
| All | All   | 16960 | 16970    | 16960    | 221     |

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 7.

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

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:120:CYS:SG   | 1:A:147:TYR:HB2  | 0.76     | 2.21        | 1      | 10    |
| 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:150:SER:HB2  | 0.62     | 1.71        | 1      | 10    |
| 1:A:87:ILE:HG12  | 1:A:118:VAL:HB   | 0.60     | 1.73        | 1      | 10    |
| 1:A:6:GLU:HB3    | 1:A:7:PRO:HD2    | 0.60     | 1.74        | 6      | 1     |
| 1:A:11:PHE:HB3   | 1:A:85:CYS:SG    | 0.57     | 2.40        | 1      | 10    |
| 1:A:101:VAL:HB   | 1:A:102:PRO:HD3  | 0.55     | 1.79        | 1      | 10    |
| 1:A:14:VAL:HG13  | 1:A:79:TYR:CE2   | 0.54     | 2.38        | 1      | 10    |
| 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:147:TYR:CE1  | 0.50     | 2.40        | 1      | 10    |
| 1:A:92:VAL:HB    | 1:A:129:ARG:HG3  | 0.50     | 1.82        | 1      | 10    |
| 1:A:147:TYR:HD2  | 1:A:159:LYS:HE2  | 0.50     | 1.65        | 1      | 10    |
| 1:A:30:HIS:CE1   | 1:A:32:THR:HB    | 0.49     | 2.43        | 1      | 10    |
| 1:A:122:ASN:O    | 1:A:123:LYS:HB2  | 0.49     | 2.07        | 1      | 10    |
| 1:A:13:LEU:HD23  | 1:A:63:VAL:HG22  | 0.48     | 1.84        | 1      | 10    |
| 1:A:30:HIS:CG    | 1:A:50:LEU:HD22  | 0.47     | 2.45        | 1      | 10    |
| 1:A:169:ILE:HD12 | 1:A:174:LEU:HD22 | 0.46     | 1.87        | 1      | 10    |
| 1:A:85:CYS:HB3   | 1:A:164:LEU:HD21 | 0.45     | 1.86        | 1      | 10    |
| 1:A:122:ASN:HA   | 1:A:149:ILE:O    | 0.45     | 2.11        | 1      | 10    |
| 1:A:16:VAL:HG11  | 1:A:104:TRP:HB3  | 0.44     | 1.89        | 1      | 10    |
| 1:A:81:ILE:HG22  | 1:A:82:GLN:HG3   | 0.42     | 1.92        | 1      | 10    |
| 1:A:166:ARG:HG2  | 1:A:174:LEU:HB3  | 0.41     | 1.91        | 1      | 10    |
| 1:A:85:CYS:SG    | 1:A:168:LEU:HD11 | 0.41     | 2.55        | 1      | 10    |
| 1:A:16:VAL:HB    | 1:A:88:ILE:HG12  | 0.40     | 1.92        | 1      | 10    |
| 1:A:91:ASP:HB3   | 1:A:94:SER:HB3   | 0.40     | 1.94        | 1      | 10    |

## 6.3 Torsion angles

### 6.3.1 Protein backbone

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

| Mol | Chain | Analysed        | Favoured      | Allowed    | Outliers   | Percentiles |     |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|------------|-------------|-----|
| 1   | A     | 211/261 (81%)   | 209±0 (99±0%) | 2±0 (1±0%) | 0±0 (0±0%) | 100         | 100 |
| All | All   | 2110/2610 (81%) | 2087 (99%)    | 23 (1%)    | 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     | 183/220 (83%)   | 183±0 (100±0%) | 0±0 (0±0%) | 100         | 100 |
| All | All   | 1830/2200 (83%) | 1830 (100%)    | 0 (0%)     | 100         | 100 |

There are no protein residues with a non-rotameric sidechain to report.

### 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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 83% for the well-defined parts and 83% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned\_chem\_shift\_list\_1*

#### 7.1.1 Bookkeeping

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                  | 2589 |
| Number of shifts mapped to atoms        | 2584 |
| Number of unparsed shifts               | 0    |
| Number of shifts with mapping errors    | 5    |
| Number of shifts with mapping warnings  | 0    |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 56   |

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

- No matching atom found in the structure. All 5 occurrences are reported below.

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 30  | HIS  | HD1  | 10.269     | 0.020       | 1         |
| 1       | A     | 53  | HIS  | HD1  | 10.367     | 0.020       | 1         |
| 1       | A     | 105 | HIS  | HE2  | 11.112     | 0.020       | 1         |
| 1       | A     | 139 | HIS  | HD1  | 10.687     | 0.020       | 1         |
| 1       | A     | 199 | HIS  | HD1  | 10.494     | 0.020       | 1         |

#### 7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus                | # values | Correction $\pm$ precision, ppm | Suggested action           |
|------------------------|----------|---------------------------------|----------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 212      | $-0.93 \pm 0.24$                | Should be checked          |
| $^{13}\text{C}_\beta$  | 198      | $0.15 \pm 0.24$                 | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}'$       | 209      | $-0.47 \pm 0.19$                | None needed ( $< 0.5$ ppm) |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Nucleus         | # values | Correction $\pm$ precision, ppm | Suggested action  |
|-----------------|----------|---------------------------------|-------------------|
| $^{15}\text{N}$ | 215      | 1.51 $\pm$ 0.55                 | Should be applied |

### 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 83%, i.e. 2463 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2959. 0 out of 40 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total           | $^1\text{H}$    | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 839/1050 (80%)  | 227/426 (53%)   | 413/424 (97%)   | 199/200 (100%)  |
| Sidechain | 1363/1643 (83%) | 972/1067 (91%)  | 328/513 (64%)   | 63/63 (100%)    |
| Aromatic  | 261/266 (98%)   | 129/129 (100%)  | 117/122 (96%)   | 15/15 (100%)    |
| Overall   | 2463/2959 (83%) | 1328/1622 (82%) | 858/1059 (81%)  | 277/278 (100%)  |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 83%, i.e. 2500 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3007. 0 out of 40 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total           | $^1\text{H}$    | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 855/1070 (80%)  | 231/434 (53%)   | 421/432 (97%)   | 203/204 (100%)  |
| Sidechain | 1384/1671 (83%) | 988/1086 (91%)  | 332/521 (64%)   | 64/64 (100%)    |
| Aromatic  | 261/266 (98%)   | 129/129 (100%)  | 117/122 (96%)   | 15/15 (100%)    |
| Overall   | 2500/3007 (83%) | 1348/1649 (82%) | 870/1075 (81%)  | 282/283 (100%)  |

### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1       | A     | 114 | ASN  | ND2  | 1114.29    | 101.55 – 123.95     | 447.1   |
| 1       | A     | 21  | THR  | HG1  | 6.38       | 0.08 – 2.19         | 24.8    |
| 1       | A     | 66  | THR  | HG1  | 6.01       | 0.08 – 2.19         | 23.1    |
| 1       | A     | 207 | THR  | HG1  | 5.99       | 0.08 – 2.19         | 23.0    |
| 1       | A     | 206 | THR  | HG1  | 5.96       | 0.08 – 2.19         | 22.8    |
| 1       | A     | 24  | THR  | HG1  | 5.91       | 0.08 – 2.19         | 22.6    |
| 1       | A     | 93  | THR  | HG1  | 5.76       | 0.08 – 2.19         | 21.9    |
| 1       | A     | 32  | THR  | HG1  | 5.71       | 0.08 – 2.19         | 21.7    |
| 1       | A     | 54  | THR  | HG1  | 5.59       | 0.08 – 2.19         | 21.1    |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1       | A     | 97  | THR  | HG1  | 5.48       | 0.08 – 2.19         | 20.6    |
| 1       | A     | 25  | THR  | HG1  | 5.39       | 0.08 – 2.19         | 20.1    |
| 1       | A     | 42  | THR  | HG1  | 5.31       | 0.08 – 2.19         | 19.8    |
| 1       | A     | 134 | LYS  | CB   | 54.58      | 24.03 – 41.47       | 12.5    |
| 1       | A     | 175 | GLU  | CA   | 76.25      | 47.03 – 67.62       | 9.2     |
| 1       | A     | 45  | VAL  | CB   | 17.10      | 23.86 – 41.50       | -8.8    |
| 1       | A     | 68  | GLY  | C    | 189.53     | 164.92 – 182.89     | 8.7     |
| 1       | A     | 151 | ALA  | C    | 160.74     | 167.61 – 188.05     | -8.4    |
| 1       | A     | 183 | ALA  | C    | 160.74     | 167.61 – 188.05     | -8.4    |
| 1       | A     | 37  | LYS  | NZ   | 53.20      | 19.79 – 46.09       | 7.7     |
| 1       | A     | 38  | LYS  | NZ   | 52.40      | 19.79 – 46.09       | 7.4     |
| 1       | A     | 143 | ASN  | ND2  | 129.29     | 101.55 – 123.95     | 7.4     |
| 1       | A     | 158 | GLU  | CA   | 72.15      | 47.03 – 67.62       | 7.2     |
| 1       | A     | 44  | GLY  | CA   | 54.58      | 38.93 – 51.79       | 7.2     |
| 1       | A     | 29  | ARG  | CA   | 72.15      | 45.44 – 68.13       | 6.8     |
| 1       | A     | 33  | GLY  | C    | 161.91     | 164.92 – 182.89     | -6.7    |
| 1       | A     | 123 | LYS  | CA   | 70.98      | 46.18 – 67.77       | 6.5     |
| 1       | A     | 170 | GLY  | C    | 162.50     | 164.92 – 182.89     | -6.3    |
| 1       | A     | 132 | LYS  | NZ   | 49.59      | 19.79 – 46.09       | 6.3     |
| 1       | A     | 94  | SER  | C    | 163.97     | 166.15 – 183.14     | -6.3    |
| 1       | A     | 123 | LYS  | NZ   | 49.29      | 19.79 – 46.09       | 6.2     |
| 1       | A     | 134 | LYS  | NZ   | 49.30      | 19.79 – 46.09       | 6.2     |
| 1       | A     | 12  | LYS  | NZ   | 49.23      | 19.79 – 46.09       | 6.2     |
| 1       | A     | 141 | LYS  | NZ   | 49.24      | 19.79 – 46.09       | 6.2     |
| 1       | A     | 142 | LYS  | NZ   | 49.22      | 19.79 – 46.09       | 6.2     |
| 1       | A     | 152 | LYS  | NZ   | 49.22      | 19.79 – 46.09       | 6.2     |
| 1       | A     | 71  | LYS  | NZ   | 49.00      | 19.79 – 46.09       | 6.1     |
| 1       | A     | 119 | LEU  | CA   | 42.87      | 45.17 – 66.21       | -6.1    |
| 1       | A     | 22  | GLY  | C    | 184.81     | 164.92 – 182.89     | 6.1     |
| 1       | A     | 161 | PHE  | CE2  | 137.89     | 124.80 – 136.72     | 6.0     |
| 1       | A     | 165 | ALA  | C    | 165.72     | 167.61 – 188.05     | -5.9    |
| 1       | A     | 110 | ARG  | NE   | 94.02      | 76.53 – 92.65       | 5.8     |
| 1       | A     | 60  | LYS  | NZ   | 48.29      | 19.79 – 46.09       | 5.8     |
| 1       | A     | 113 | GLU  | CA   | 69.22      | 47.03 – 67.62       | 5.8     |
| 1       | A     | 154 | ASN  | ND2  | 125.21     | 101.55 – 123.95     | 5.6     |
| 1       | A     | 20  | GLY  | N    | 129.37     | 91.59 – 127.52      | 5.5     |
| 1       | A     | 127 | LYS  | NZ   | 47.33      | 19.79 – 46.09       | 5.5     |
| 1       | A     | 29  | ARG  | NE   | 93.29      | 76.53 – 92.65       | 5.4     |
| 1       | A     | 76  | ARG  | NE   | 93.29      | 76.53 – 92.65       | 5.4     |
| 1       | A     | 67  | ALA  | N    | 104.86     | 106.13 – 140.55     | -5.4    |
| 1       | A     | 194 | ALA  | C    | 166.90     | 167.61 – 188.05     | -5.3    |
| 1       | A     | 167 | LYS  | NZ   | 46.77      | 19.79 – 46.09       | 5.3     |

*Continued on next page...*

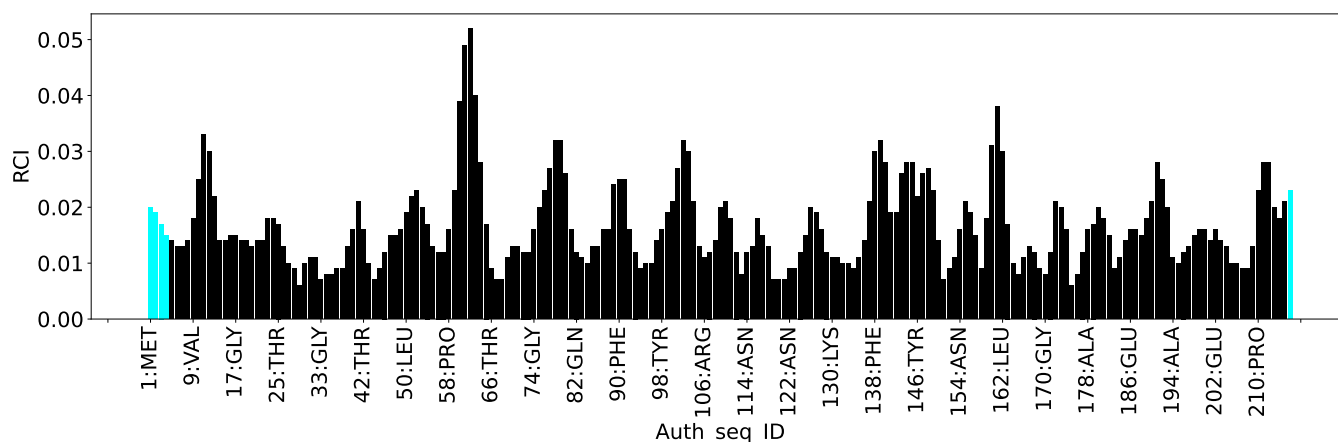
Continued from previous page...

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1       | A     | 84  | GLN  | H    | 11.17      | 5.39 – 11.05        | 5.2     |
| 1       | A     | 17  | GLY  | N    | 127.91     | 91.59 – 127.52      | 5.1     |
| 1       | A     | 33  | GLY  | N    | 127.84     | 91.59 – 127.52      | 5.1     |
| 1       | A     | 57  | GLY  | N    | 127.71     | 91.59 – 127.52      | 5.0     |
| 1       | A     | 161 | PHE  | CE1  | 137.30     | 124.17 – 137.29     | 5.0     |

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



## 8 NMR restraints analysis [i](#)

### 8.1 Conformationally restricting restraints [i](#)

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

| Description                                              | Value |
|----------------------------------------------------------|-------|
| Total distance restraints                                | 0     |
| Intra-residue ( $ i-j =0$ )                              | 0     |
| Sequential ( $ i-j =1$ )                                 | 0     |
| Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )                 | 0     |
| Long range ( $ i-j \geq 5$ )                             | 0     |
| Inter-chain                                              | 0     |
| Hydrogen bond restraints                                 | 0     |
| Disulfide bond restraints                                | 0     |
| Total dihedral-angle restraints                          | 270   |
| Number of unmapped restraints                            | 0     |
| Number of restraints per residue                         | 0     |
| Number of long range restraints per residue <sup>1</sup> | 0     |

<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 [i](#)

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

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

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation. There are no distance restraints

#### 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) | 20.1                                   | 9.91    |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Bins (°)           | Average number of violations per model | Max (°) |
|--------------------|----------------------------------------|---------|
| 10.0-20.0 (Medium) | 14.1                                   | 19.83   |
| >20.0 (Large)      | 90.2                                   | 156.92  |

## 9 Distance violation analysis ⓘ

No distance restraints data found

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

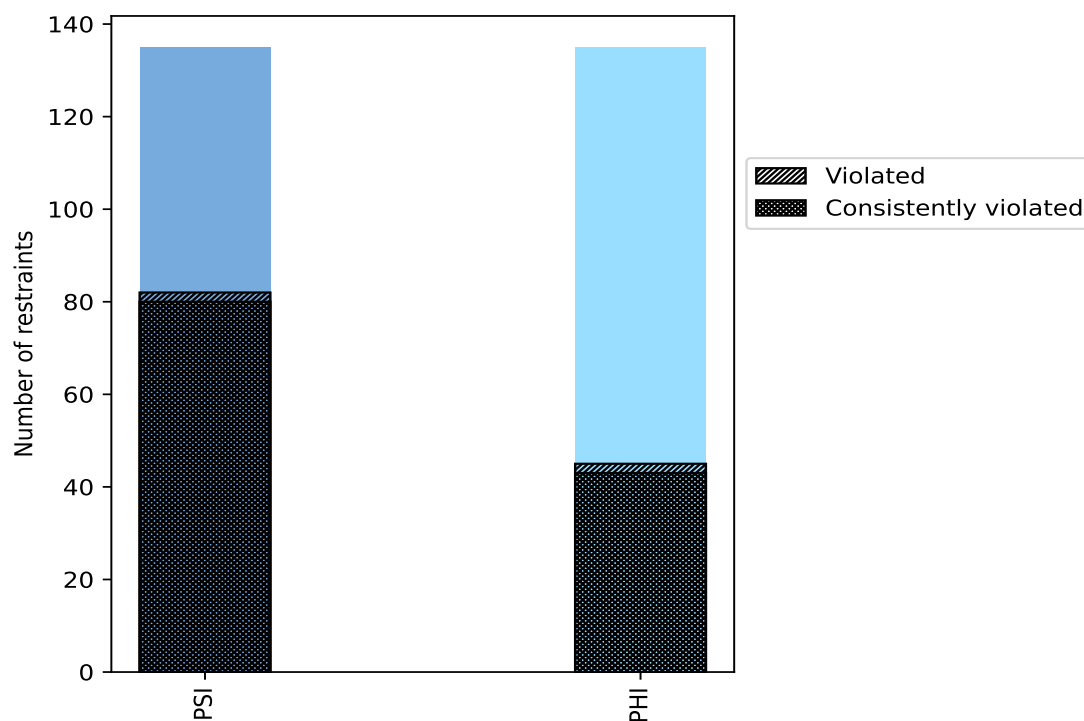
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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        | 135   | 50.0           | 82                    | 60.7           | 30.4           | 80                                 | 59.3           | 29.6           |
| PHI        | 135   | 50.0           | 45                    | 33.3           | 16.7           | 43                                 | 31.9           | 15.9           |
| Total      | 270   | 100.0          | 127                   | 47.0           | 47.0           | 123                                | 45.6           | 45.6           |

<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](#)



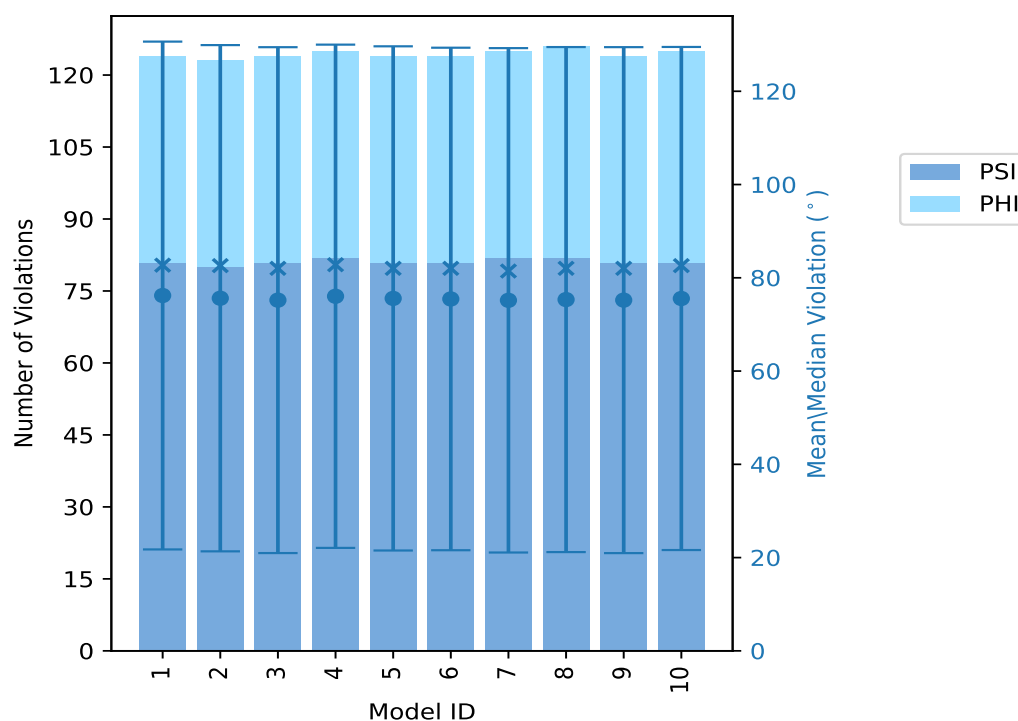
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

| Model ID | Number of violations |     |       | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
|          | PSI                  | PHI | Total |          |         |        |            |
| 1        | 81                   | 43  | 124   | 76.2     | 156.92  | 54.45  | 82.71      |
| 2        | 80                   | 43  | 123   | 75.62    | 156.92  | 54.28  | 82.61      |
| 3        | 81                   | 43  | 124   | 75.21    | 156.92  | 54.24  | 82.03      |
| 4        | 82                   | 43  | 125   | 76.04    | 156.92  | 53.96  | 82.81      |
| 5        | 81                   | 43  | 124   | 75.58    | 156.92  | 54.06  | 82.03      |
| 6        | 81                   | 43  | 124   | 75.46    | 156.92  | 53.88  | 82.03      |
| 7        | 82                   | 43  | 125   | 75.17    | 156.92  | 54.08  | 81.45      |
| 8        | 82                   | 44  | 126   | 75.33    | 156.92  | 54.15  | 82.03      |
| 9        | 81                   | 43  | 124   | 75.21    | 156.92  | 54.25  | 82.03      |
| 10       | 81                   | 44  | 125   | 75.56    | 156.92  | 53.94  | 82.61      |

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



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

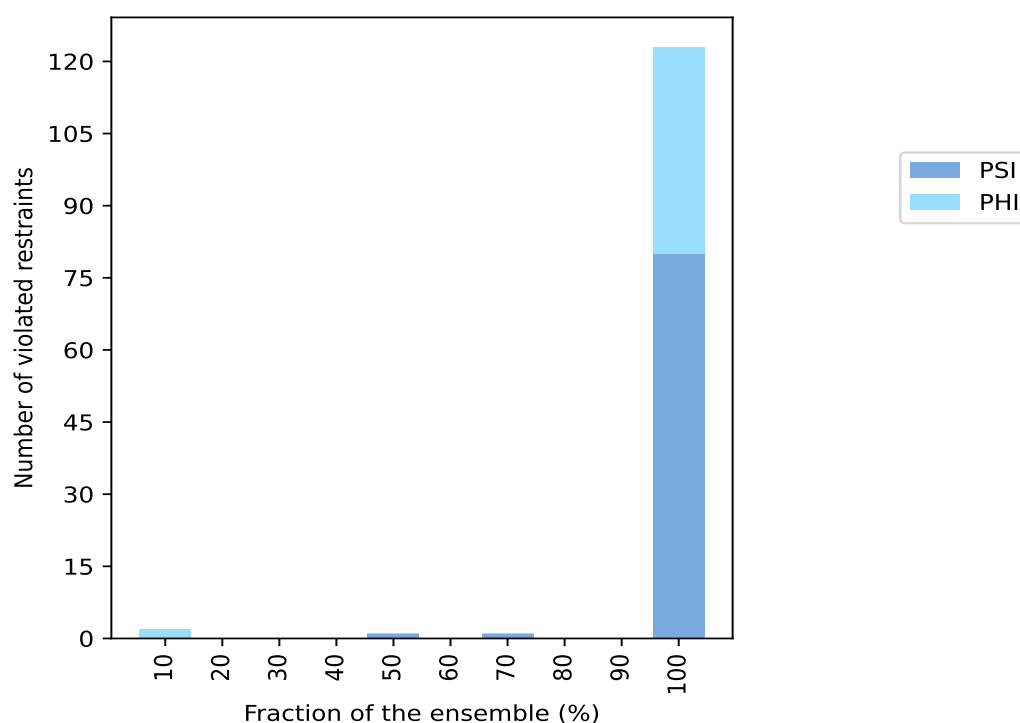
### 10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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

| Number of violated restraints |     |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PSI                           | PHI | Total | Count <sup>1</sup>       | %     |
| 0                             | 2   | 2     | 1                        | 10.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 2                        | 20.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 3                        | 30.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 4                        | 40.0  |
| 1                             | 0   | 1     | 5                        | 50.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 6                        | 60.0  |
| 1                             | 0   | 1     | 7                        | 70.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 8                        | 80.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 9                        | 90.0  |
| 80                            | 43  | 123   | 10                       | 100.0 |

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

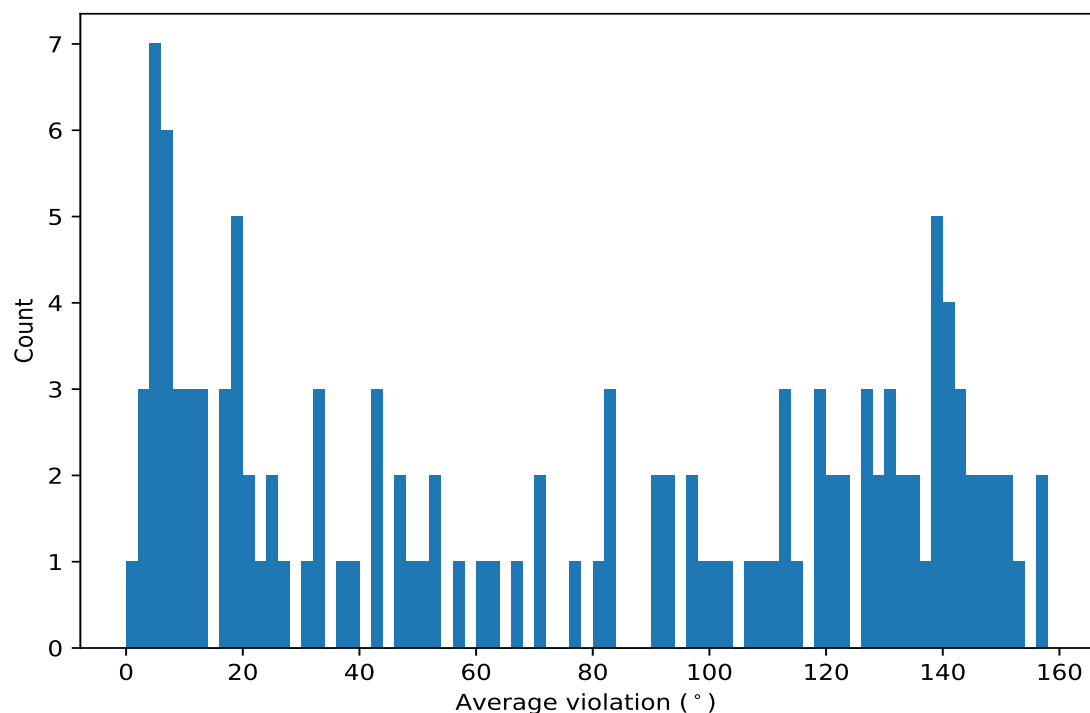
#### 10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



## 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 [i](#)

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

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 10                  | 156.92 | 0.0             | 156.92 |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 10                  | 156.21 | 0.0             | 156.21 |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 10                  | 152.66 | 0.0             | 152.66 |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 10                  | 150.58 | 0.0             | 150.58 |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 10                  | 150.54 | 0.0             | 150.54 |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 10                  | 149.94 | 0.0             | 149.94 |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 10                  | 149.41 | 0.0             | 149.41 |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 10                  | 147.82 | 0.0             | 147.82 |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 10                  | 147.75 | 0.0             | 147.75 |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 10                  | 145.15 | 0.0             | 145.15 |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 10                  | 144.17 | 0.0             | 144.17 |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 10                  | 143.66 | 0.0             | 143.66 |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 10                  | 143.13 | 0.0             | 143.13 |

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) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C  | 1:127:A:LYS:N | 10                  | 143.0  | 0.0             | 143.0  |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:ALA:N | 10                  | 141.48 | 0.0             | 141.48 |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C  | 1:208:A:ALA:N | 10                  | 140.89 | 0.0             | 140.89 |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C   | 1:39:A:TYR:N  | 10                  | 140.83 | 0.0             | 140.83 |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:PRO:N   | 10                  | 140.54 | 6.23            | 142.62 |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C   | 1:72:A:PHE:N  | 10                  | 139.75 | 0.0             | 139.75 |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C    | 1:8:A:GLN:N   | 10                  | 139.1  | 0.0             | 139.1  |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C   | 1:60:A:LYS:N  | 10                  | 138.77 | 0.0             | 138.77 |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C   | 1:15:A:LEU:N  | 10                  | 138.73 | 0.0             | 138.73 |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C  | 1:153:A:SER:N | 10                  | 138.55 | 0.0             | 138.55 |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C  | 1:135:A:SER:N | 10                  | 137.62 | 0.0             | 137.62 |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C  | 1:214:A:ASP:N | 10                  | 134.27 | 0.0             | 134.27 |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C  | 1:104:A:TRP:N | 10                  | 134.09 | 0.0             | 134.09 |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 10                  | 133.89 | 0.0             | 133.89 |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 10                  | 132.04 | 0.0             | 132.04 |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 10                  | 131.43 | 0.0             | 131.43 |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 10                  | 131.41 | 0.0             | 131.41 |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 10                  | 130.34 | 0.0             | 130.34 |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C  | 1:116:A:PRO:N | 10                  | 129.6  | 0.0             | 129.6  |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C    | 1:10:A:GLN:N  | 10                  | 128.73 | 0.0             | 128.73 |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C   | 1:90:A:PHE:N  | 10                  | 127.72 | 0.0             | 127.72 |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C   | 1:25:A:THR:N  | 10                  | 127.64 | 0.0             | 127.64 |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C   | 1:13:A:LEU:N  | 10                  | 126.29 | 0.0             | 126.29 |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C  | 1:119:A:LEU:N | 10                  | 122.83 | 0.0             | 122.83 |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C  | 1:190:A:ASP:N | 10                  | 122.82 | 0.0             | 122.82 |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA  | 1:82:A:GLN:C  | 10                  | 121.83 | 0.0             | 121.83 |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C  | 1:189:A:MET:N | 10                  | 120.43 | 0.0             | 120.43 |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C  | 1:150:A:SER:N | 10                  | 119.88 | 0.0             | 119.88 |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C   | 1:51:A:VAL:N  | 10                  | 118.88 | 0.0             | 118.88 |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C  | 1:180:A:PRO:N | 10                  | 118.4  | 0.0             | 118.4  |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C  | 10                  | 115.42 | 0.0             | 115.42 |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C  | 1:182:A:LEU:N | 10                  | 113.52 | 0.0             | 113.52 |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C  | 1:132:A:LYS:N | 10                  | 113.24 | 0.0             | 113.24 |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C  | 1:175:A:GLU:N | 10                  | 112.39 | 0.0             | 112.39 |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C  | 1:137:A:VAL:N | 10                  | 110.64 | 0.0             | 110.64 |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C  | 1:213:A:ASP:N | 10                  | 109.67 | 0.0             | 109.67 |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 10                  | 106.69 | 0.0             | 106.69 |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C   | 1:11:A:PHE:N  | 10                  | 102.02 | 0.0             | 102.02 |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 10                  | 100.9  | 0.0             | 100.9  |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 10                  | 99.53  | 0.0             | 99.53  |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 10                  | 97.25  | 0.0             | 97.25  |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 10                  | 96.88  | 0.0             | 96.88  |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 10                  | 93.43  | 0.0             | 93.43  |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C   | 1:88:A:ILE:N  | 10                  | 92.77  | 0.0             | 92.77  |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C    | 1:9:A:VAL:N   | 10                  | 90.64  | 0.0             | 90.64  |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C   | 1:41:A:ALA:N  | 10                  | 90.62  | 0.0             | 90.62  |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C   | 1:61:A:PHE:N  | 10                  | 83.58  | 0.0             | 83.58  |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C  | 1:185:A:PRO:N | 10                  | 82.81  | 0.0             | 82.81  |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C   | 1:14:A:VAL:N  | 10                  | 82.61  | 0.0             | 82.61  |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C  | 1:177:A:VAL:N | 10                  | 81.45  | 0.0             | 81.45  |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C  | 1:120:A:CYS:N | 10                  | 70.17  | 0.0             | 70.17  |

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 |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C   | 1:50:A:LEU:N  | 10                  | 66.42 | 0.0             | 66.42  |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C   | 1:95:A:ARG:N  | 10                  | 63.07 | 0.0             | 63.07  |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 10                  | 61.64 | 0.0             | 61.64  |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 10                  | 56.96 | 0.0             | 56.96  |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 10                  | 53.91 | 0.0             | 53.91  |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 10                  | 53.26 | 0.0             | 53.26  |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 10                  | 50.65 | 0.0             | 50.65  |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 10                  | 49.85 | 0.0             | 49.85  |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 10                  | 46.98 | 0.0             | 46.98  |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 10                  | 46.31 | 0.0             | 46.31  |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 10                  | 43.94 | 0.0             | 43.94  |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N  | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 10                  | 43.89 | 0.0             | 43.89  |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N  | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 10                  | 42.23 | 0.0             | 42.23  |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N   | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 10                  | 38.39 | 0.0             | 38.39  |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N   | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 10                  | 36.53 | 0.0             | 36.53  |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N  | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 10                  | 33.69 | 0.0             | 33.69  |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N   | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 10                  | 32.96 | 0.0             | 32.96  |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 10                  | 32.89 | 0.0             | 32.89  |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 10                  | 30.13 | 0.0             | 30.13  |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 10                  | 27.28 | 0.0             | 27.28  |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 10                  | 25.81 | 0.0             | 25.81  |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 10                  | 24.22 | 0.0             | 24.22  |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 10                  | 23.24 | 0.0             | 23.24  |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 10                  | 21.83 | 0.0             | 21.83  |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 10                  | 21.38 | 0.0             | 21.38  |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 10                  | 19.83 | 0.0             | 19.83  |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 10                  | 19.72 | 0.0             | 19.72  |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 10                  | 19.39 | 0.0             | 19.39  |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 10                  | 18.32 | 0.0             | 18.32  |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA  | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 10                  | 18.05 | 0.0             | 18.05  |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N  | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 10                  | 17.88 | 0.0             | 17.88  |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N  | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 10                  | 17.06 | 0.0             | 17.06  |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N   | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 10                  | 16.68 | 0.0             | 16.68  |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N   | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 10                  | 13.44 | 0.0             | 13.44  |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N   | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 10                  | 12.47 | 0.0             | 12.47  |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N  | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 10                  | 12.21 | 0.0             | 12.21  |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 10                  | 10.93 | 0.0             | 10.93  |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 10                  | 10.83 | 0.0             | 10.83  |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 10                  | 10.53 | 0.0             | 10.53  |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 10                  | 9.91  | 0.0             | 9.91   |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 10                  | 9.91  | 0.0             | 9.91   |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 10                  | 8.54  | 0.0             | 8.54   |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA  | 1:26:A:PHE:C  | 10                  | 7.97  | 0.0             | 7.97   |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C  | 1:211:A:ASP:N | 10                  | 7.42  | 0.0             | 7.42   |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C  | 1:174:A:LEU:N | 10                  | 7.41  | 0.0             | 7.41   |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C   | 1:70:A:GLU:N  | 10                  | 7.01  | 0.0             | 7.01   |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 10                  | 6.56  | 0.0             | 6.56   |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 10                  | 6.03  | 0.0             | 6.03   |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 10                  | 5.94  | 0.0             | 5.94   |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 10                  | 5.62  | 0.0             | 5.62   |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 10                  | 5.48  | 0.0             | 5.48   |

Continued on next page...

Continued from previous page...

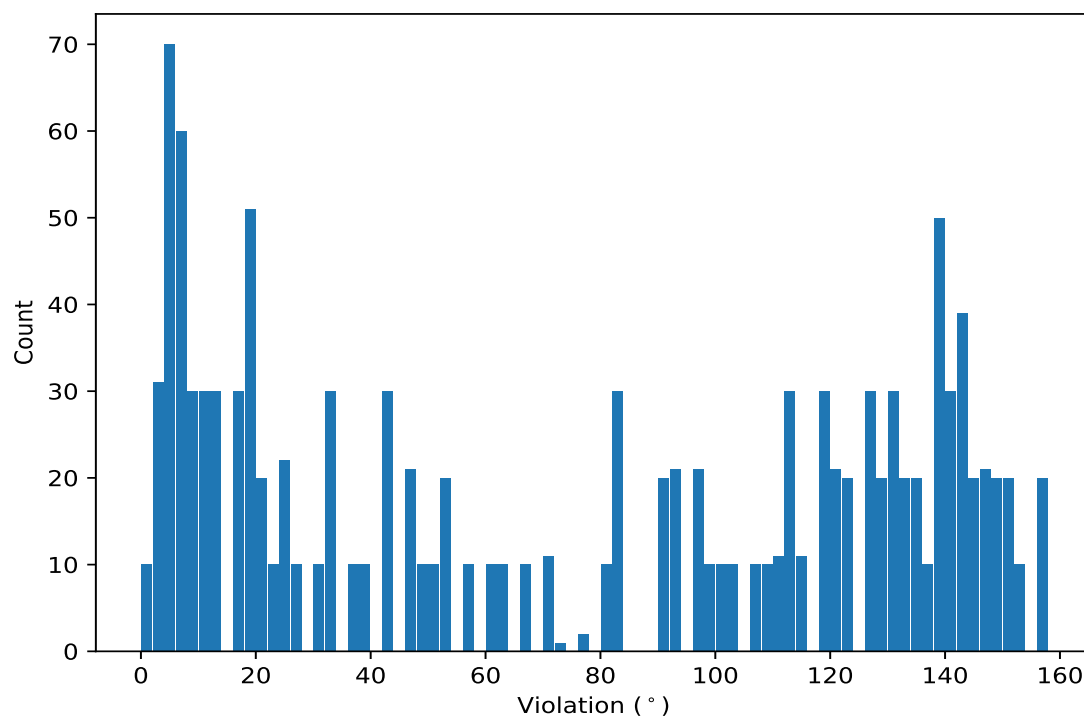
| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 10                  | 5.44  | 0.0             | 5.44   |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 10                  | 5.01  | 0.0             | 5.01   |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 10                  | 4.86  | 0.0             | 4.86   |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 10                  | 4.38  | 0.0             | 4.38   |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 10                  | 2.91  | 0.0             | 2.91   |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 10                  | 2.91  | 0.0             | 2.91   |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C   | 1:19:A:GLY:N  | 10                  | 2.88  | 0.0             | 2.88   |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C  | 1:160:A:PRO:N | 10                  | 1.81  | 0.0             | 1.81   |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C    | 1:3:A:ALA:N   | 7                   | 70.27 | 49.13           | 47.11  |
| (1,4)   | 1:4:A:GLN:N   | 1:4:A:GLN:CA   | 1:4:A:GLN:C    | 1:5:A:GLY:N   | 5                   | 77.98 | 7.82            | 76.1   |

<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 (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 1        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 2        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 3        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 4        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 5        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 6        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 7        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 8        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 9        | 156.92        |
| (1,82)  | 1:66:A:THR:N  | 1:66:A:THR:CA  | 1:66:A:THR:C  | 1:67:A:ALA:N  | 10       | 156.92        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 1        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 2        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 3        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 4        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 5        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 6        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 7        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 8        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 9        | 156.21        |
| (1,208) | 1:165:A:ALA:N | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1:166:A:ARG:N | 10       | 156.21        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 1        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 2        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 3        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 4        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 5        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 6        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 7        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 8        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 9        | 152.66        |
| (1,96)  | 1:81:A:ILE:N  | 1:81:A:ILE:CA  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N  | 10       | 152.66        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 1        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 2        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 3        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 4        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 5        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 6        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 7        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 8        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 9        | 150.58        |
| (1,100) | 1:84:A:GLN:N  | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1:85:A:CYS:N  | 10       | 150.58        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 2        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 3        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 4        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 5        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 6        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 7        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 8        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 9        | 150.54        |
| (1,262) | 1:209:A:LEU:N | 1:209:A:LEU:CA | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 10       | 150.54        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 1        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 2        | 149.94        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 3        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 4        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 5        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 6        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 7        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 8        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 9        | 149.94        |
| (1,72)  | 1:56:A:ARG:N  | 1:56:A:ARG:CA  | 1:56:A:ARG:C  | 1:57:A:GLY:N  | 10       | 149.94        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 2        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 3        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 4        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 5        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 6        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 7        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 8        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 9        | 149.41        |
| (1,148) | 1:117:A:ILE:N | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 10       | 149.41        |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C   | 1:3:A:ALA:N   | 1        | 147.91        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 1        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 2        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 3        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 4        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 5        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 6        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 7        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 8        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 9        | 147.82        |
| (1,28)  | 1:23:A:LYS:N  | 1:23:A:LYS:CA  | 1:23:A:LYS:C  | 1:24:A:THR:N  | 10       | 147.82        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 1        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 2        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 3        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 4        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 5        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 6        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 7        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 8        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 9        | 147.75        |
| (1,42)  | 1:32:A:THR:N  | 1:32:A:THR:CA  | 1:32:A:THR:C  | 1:33:A:GLY:N  | 10       | 147.75        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 1        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 2        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 3        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 4        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 5        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 6        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 7        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 8        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 9        | 145.15        |
| (1,46)  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1:36:A:GLU:N  | 10       | 145.15        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 1        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 2        | 144.17        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 3        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 4        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 5        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 6        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 7        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 8        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 9        | 144.17        |
| (1,220) | 1:178:A:ALA:N | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N | 10       | 144.17        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 2        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 3        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 4        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 5        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 6        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 7        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 8        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 9        | 143.66        |
| (1,44)  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 10       | 143.66        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 1        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 2        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 3        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 4        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 5        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 6        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 7        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 8        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 9        | 143.13        |
| (1,94)  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1:78:A:GLY:N  | 10       | 143.13        |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 1        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 2        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 3        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 4        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 5        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 6        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 7        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 8        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 9        | 143.0         |
| (1,160) | 1:126:A:ILE:N | 1:126:A:ILE:CA | 1:126:A:ILE:C | 1:127:A:LYS:N | 10       | 143.0         |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 1        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 2        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 3        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 4        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 5        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 7        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 8        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 9        | 142.62        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 10       | 142.62        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 1        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 2        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 3        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 4        | 141.48        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 5        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 6        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 7        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 8        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 9        | 141.48        |
| (1,170) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:ALA:N | 10       | 141.48        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 1        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 2        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 3        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 4        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 5        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 6        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 7        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 8        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 9        | 140.89        |
| (1,258) | 1:207:A:THR:N | 1:207:A:THR:CA | 1:207:A:THR:C | 1:208:A:ALA:N | 10       | 140.89        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 1        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 2        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 3        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 4        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 5        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 6        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 7        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 8        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 9        | 140.83        |
| (1,50)  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1:39:A:TYR:N  | 10       | 140.83        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 1        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 2        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 3        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 4        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 5        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 6        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 7        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 8        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 9        | 139.75        |
| (1,90)  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1:72:A:PHE:N  | 10       | 139.75        |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 1        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 2        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 3        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 4        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 5        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 6        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 7        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 8        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 9        | 139.1         |
| (1,8)   | 1:7:A:PRO:N   | 1:7:A:PRO:CA   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N   | 10       | 139.1         |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 1        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 2        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 3        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 4        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 5        | 138.77        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 6        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 7        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 8        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 9        | 138.77        |
| (1,76)  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1:60:A:LYS:N  | 10       | 138.77        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 1        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 2        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 3        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 4        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 5        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 6        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 7        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 8        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 9        | 138.73        |
| (1,22)  | 1:14:A:VAL:N  | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1:15:A:LEU:N  | 10       | 138.73        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 1        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 2        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 3        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 4        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 5        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 6        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 7        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 8        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 9        | 138.55        |
| (1,194) | 1:152:A:LYS:N | 1:152:A:LYS:CA | 1:152:A:LYS:C | 1:153:A:SER:N | 10       | 138.55        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 1        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 2        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 3        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 4        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 5        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 6        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 7        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 8        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 9        | 137.62        |
| (1,172) | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1:135:A:SER:N | 10       | 137.62        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 1        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 2        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 3        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 4        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 5        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 6        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 7        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 8        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 9        | 134.27        |
| (1,270) | 1:213:A:ASP:N | 1:213:A:ASP:CA | 1:213:A:ASP:C | 1:214:A:ASP:N | 10       | 134.27        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C | 1:104:A:TRP:N | 1        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C | 1:104:A:TRP:N | 2        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C | 1:104:A:TRP:N | 3        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C | 1:104:A:TRP:N | 4        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C | 1:104:A:TRP:N | 5        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C | 1:104:A:TRP:N | 6        | 134.09        |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C  | 1:104:A:TRP:N | 7        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C  | 1:104:A:TRP:N | 8        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C  | 1:104:A:TRP:N | 9        | 134.09        |
| (1,130) | 1:103:A:ASN:N | 1:103:A:ASN:CA | 1:103:A:ASN:C  | 1:104:A:TRP:N | 10       | 134.09        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 1        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 2        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 3        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 4        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 5        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 6        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 7        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 8        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 9        | 133.89        |
| (1,226) | 1:182:A:LEU:N | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C  | 1:183:A:ALA:N | 10       | 133.89        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 1        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 2        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 3        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 4        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 5        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 6        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 7        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 8        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 9        | 132.04        |
| (1,188) | 1:146:A:TYR:N | 1:146:A:TYR:CA | 1:146:A:TYR:C  | 1:147:A:TYR:N | 10       | 132.04        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 1        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 2        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 3        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 4        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 5        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 6        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 7        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 8        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 9        | 131.43        |
| (1,199) | 1:155:A:TYR:C | 1:156:A:ASN:N  | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C | 10       | 131.43        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 2        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 3        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 4        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 5        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 6        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 7        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 8        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 9        | 131.41        |
| (1,211) | 1:172:A:PRO:C | 1:173:A:ASN:N  | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 10       | 131.41        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 1        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 2        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 3        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 4        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 5        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 6        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C  | 1:131:A:VAL:N | 7        | 130.34        |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 1:131:A:VAL:N | 8        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 1:131:A:VAL:N | 9        | 130.34        |
| (1,166) | 1:130:A:LYS:N | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 1:131:A:VAL:N | 10       | 130.34        |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 1        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 2        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 3        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 4        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 5        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 6        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 7        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 8        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 9        | 129.6         |
| (1,144) | 1:115:A:ILE:N | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N | 10       | 129.6         |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 1        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 2        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 3        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 4        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 5        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 6        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 7        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 8        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 9        | 128.73        |
| (1,12)  | 1:9:A:VAL:N   | 1:9:A:VAL:CA   | 1:9:A:VAL:C   | 1:10:A:GLN:N  | 10       | 128.73        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 1        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 2        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 3        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 4        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 5        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 6        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 7        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 8        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 9        | 127.72        |
| (1,106) | 1:89:A:MET:N  | 1:89:A:MET:CA  | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N  | 10       | 127.72        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 1        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 2        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 3        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 4        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 5        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 6        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 7        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 8        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 9        | 127.64        |
| (1,30)  | 1:24:A:THR:N  | 1:24:A:THR:CA  | 1:24:A:THR:C  | 1:25:A:THR:N  | 10       | 127.64        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 1        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 2        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 3        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 4        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 5        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 6        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 7        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 8        | 126.29        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 9        | 126.29        |
| (1,18)  | 1:12:A:LYS:N  | 1:12:A:LYS:CA  | 1:12:A:LYS:C  | 1:13:A:LEU:N  | 10       | 126.29        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 1        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 2        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 3        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 4        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 5        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 6        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 7        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 8        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 9        | 122.83        |
| (1,150) | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1:119:A:LEU:N | 10       | 122.83        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 1        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 2        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 3        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 4        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 5        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 6        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 7        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 8        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 9        | 122.82        |
| (1,234) | 1:189:A:MET:N | 1:189:A:MET:CA | 1:189:A:MET:C | 1:190:A:ASP:N | 10       | 122.82        |
| (1,6)   | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:PRO:N   | 6        | 121.84        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 1        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 2        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 3        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 4        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 5        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 6        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 7        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 8        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 9        | 121.83        |
| (1,97)  | 1:81:A:ILE:C  | 1:82:A:GLN:N   | 1:82:A:GLN:CA | 1:82:A:GLN:C  | 10       | 121.83        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 1        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 2        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 3        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 4        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 5        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 6        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 7        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 8        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 9        | 120.43        |
| (1,232) | 1:188:A:VAL:N | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1:189:A:MET:N | 10       | 120.43        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 2        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 3        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 4        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 5        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 6        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 7        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 8        | 119.88        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 9        | 119.88        |
| (1,190) | 1:149:A:ILE:N | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 10       | 119.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 1        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 2        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 3        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 4        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 5        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 6        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 7        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 8        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 9        | 118.88        |
| (1,62)  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1:51:A:VAL:N  | 10       | 118.88        |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 1        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 2        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 3        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 4        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 5        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 6        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 7        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 8        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 9        | 118.4         |
| (1,222) | 1:179:A:MET:N | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1:180:A:PRO:N | 10       | 118.4         |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C   | 1:3:A:ALA:N   | 8        | 115.91        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 1        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 2        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 3        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 4        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 5        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 6        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 7        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 8        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 9        | 115.42        |
| (1,109) | 1:90:A:PHE:C  | 1:91:A:ASP:N   | 1:91:A:ASP:CA | 1:91:A:ASP:C  | 10       | 115.42        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 1        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 2        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 3        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 4        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 5        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 6        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 7        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 8        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 9        | 113.52        |
| (1,224) | 1:181:A:ALA:N | 1:181:A:ALA:CA | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N | 10       | 113.52        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 1        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 2        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 3        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 4        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 5        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 6        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 7        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 8        | 113.24        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 9        | 113.24        |
| (1,168) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:LYS:N | 10       | 113.24        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 1        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 2        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 3        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 4        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 5        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 6        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 7        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 8        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 9        | 112.39        |
| (1,214) | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 10       | 112.39        |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C   | 1:3:A:ALA:N   | 4        | 110.72        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 1        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 2        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 3        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 4        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 5        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 6        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 7        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 8        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 9        | 110.64        |
| (1,174) | 1:136:A:ILE:N | 1:136:A:ILE:CA | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N | 10       | 110.64        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 1        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 2        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 3        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 4        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 5        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 6        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 7        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 8        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 9        | 109.67        |
| (1,268) | 1:212:A:GLU:N | 1:212:A:GLU:CA | 1:212:A:GLU:C | 1:213:A:ASP:N | 10       | 109.67        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 1        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 2        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 3        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 4        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 5        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 6        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 7        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 8        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 9        | 106.69        |
| (1,59)  | 1:48:A:HIS:C  | 1:49:A:PRO:N   | 1:49:A:PRO:CA | 1:49:A:PRO:C  | 10       | 106.69        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 1        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 2        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 3        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 4        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 5        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 6        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 7        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C  | 1:11:A:PHE:N  | 8        | 102.02        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C   | 1:11:A:PHE:N  | 9        | 102.02        |
| (1,14)  | 1:10:A:GLN:N  | 1:10:A:GLN:CA  | 1:10:A:GLN:C   | 1:11:A:PHE:N  | 10       | 102.02        |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 1        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 2        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 3        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 4        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 5        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 6        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 7        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 8        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 9        | 100.9         |
| (1,87)  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N   | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C  | 10       | 100.9         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 1        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 2        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 3        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 4        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 5        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 6        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 7        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 8        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 9        | 99.53         |
| (1,146) | 1:116:A:PRO:N | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C  | 1:117:A:ILE:N | 10       | 99.53         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 1        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 2        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 3        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 4        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 5        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 6        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 7        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 8        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 9        | 97.25         |
| (1,54)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:LEU:N  | 10       | 97.25         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ALA:N    | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C   | 10       | 97.13         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 2        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 3        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 4        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 5        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 6        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 7        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 8        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 9        | 96.88         |
| (1,227) | 1:183:A:ALA:C | 1:184:A:PRO:N  | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 10       | 96.88         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 1        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 2        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 3        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 4        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 5        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 6        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 7        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C   | 1:12:A:LYS:N  | 8        | 93.43         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C  | 1:12:A:LYS:N  | 9        | 93.43         |
| (1,16)  | 1:11:A:PHE:N  | 1:11:A:PHE:CA  | 1:11:A:PHE:C  | 1:12:A:LYS:N  | 10       | 93.43         |
| (1,4)   | 1:4:A:GLN:N   | 1:4:A:GLN:CA   | 1:4:A:GLN:C   | 1:5:A:GLY:N   | 4        | 92.93         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 1        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 2        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 3        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 4        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 5        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 6        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 7        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 8        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 9        | 92.77         |
| (1,104) | 1:87:A:ILE:N  | 1:87:A:ILE:CA  | 1:87:A:ILE:C  | 1:88:A:ILE:N  | 10       | 92.77         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 1        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 2        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 3        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 4        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 5        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 6        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 7        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 8        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 9        | 90.64         |
| (1,10)  | 1:8:A:GLN:N   | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1:9:A:VAL:N   | 10       | 90.64         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 1        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 2        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 3        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 4        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 5        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 6        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 7        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 8        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 9        | 90.62         |
| (1,52)  | 1:40:A:VAL:N  | 1:40:A:VAL:CA  | 1:40:A:VAL:C  | 1:41:A:ALA:N  | 10       | 90.62         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 1        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 2        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 3        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 4        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 5        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 6        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 7        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 8        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 9        | 83.58         |
| (1,78)  | 1:60:A:LYS:N  | 1:60:A:LYS:CA  | 1:60:A:LYS:C  | 1:61:A:PHE:N  | 10       | 83.58         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 1        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 2        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 3        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 4        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 5        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 6        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 7        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 8        | 82.81         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 9        | 82.81         |
| (1,228) | 1:184:A:PRO:N | 1:184:A:PRO:CA | 1:184:A:PRO:C | 1:185:A:PRO:N | 10       | 82.81         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 1        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 2        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 3        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 4        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 5        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 6        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 7        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 8        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 9        | 82.61         |
| (1,20)  | 1:13:A:LEU:N  | 1:13:A:LEU:CA  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N  | 10       | 82.61         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 1        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 2        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 3        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 4        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 5        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 6        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 7        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 8        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 9        | 81.45         |
| (1,218) | 1:176:A:PHE:N | 1:176:A:PHE:CA | 1:176:A:PHE:C | 1:177:A:VAL:N | 10       | 81.45         |
| (1,4)   | 1:4:A:GLN:N   | 1:4:A:GLN:CA   | 1:4:A:GLN:C   | 1:5:A:GLY:N   | 6        | 77.24         |
| (1,4)   | 1:4:A:GLN:N   | 1:4:A:GLN:CA   | 1:4:A:GLN:C   | 1:5:A:GLY:N   | 7        | 76.1          |
| (1,4)   | 1:4:A:GLN:N   | 1:4:A:GLN:CA   | 1:4:A:GLN:C   | 1:5:A:GLY:N   | 8        | 72.89         |
| (1,4)   | 1:4:A:GLN:N   | 1:4:A:GLN:CA   | 1:4:A:GLN:C   | 1:5:A:GLY:N   | 5        | 70.74         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 1        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 2        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 3        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 4        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 5        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 6        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 7        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 8        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 9        | 70.17         |
| (1,152) | 1:119:A:LEU:N | 1:119:A:LEU:CA | 1:119:A:LEU:C | 1:120:A:CYS:N | 10       | 70.17         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 1        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 2        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 3        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 4        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 5        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 6        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 7        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 8        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 9        | 66.42         |
| (1,60)  | 1:49:A:PRO:N  | 1:49:A:PRO:CA  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 10       | 66.42         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C  | 1:95:A:ARG:N  | 1        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C  | 1:95:A:ARG:N  | 2        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C  | 1:95:A:ARG:N  | 3        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C  | 1:95:A:ARG:N  | 4        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C  | 1:95:A:ARG:N  | 5        | 63.07         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C   | 1:95:A:ARG:N  | 6        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C   | 1:95:A:ARG:N  | 7        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C   | 1:95:A:ARG:N  | 8        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C   | 1:95:A:ARG:N  | 9        | 63.07         |
| (1,116) | 1:94:A:SER:N  | 1:94:A:SER:CA  | 1:94:A:SER:C   | 1:95:A:ARG:N  | 10       | 63.07         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 1        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 2        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 3        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 4        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 5        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 6        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 7        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 8        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 9        | 61.64         |
| (1,110) | 1:91:A:ASP:N  | 1:91:A:ASP:CA  | 1:91:A:ASP:C   | 1:92:A:VAL:N  | 10       | 61.64         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 1        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 2        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 3        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 4        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 5        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 6        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 7        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 8        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 9        | 56.96         |
| (1,88)  | 1:70:A:GLU:N  | 1:70:A:GLU:CA  | 1:70:A:GLU:C   | 1:71:A:LYS:N  | 10       | 56.96         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 1        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 2        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 3        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 4        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 5        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 6        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 7        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 8        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 9        | 53.91         |
| (1,207) | 1:164:A:LEU:C | 1:165:A:ALA:N  | 1:165:A:ALA:CA | 1:165:A:ALA:C | 10       | 53.91         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 1        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 2        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 3        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 4        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 5        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 6        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 7        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 8        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 9        | 53.26         |
| (1,200) | 1:156:A:ASN:N | 1:156:A:ASN:CA | 1:156:A:ASN:C  | 1:157:A:PHE:N | 10       | 53.26         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 1        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 2        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 3        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 4        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 5        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 6        | 50.65         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 7        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 8        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 9        | 50.65         |
| (1,260) | 1:208:A:ALA:N | 1:208:A:ALA:CA | 1:208:A:ALA:C  | 1:209:A:LEU:N | 10       | 50.65         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 1        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 2        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 3        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 4        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 5        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 6        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 7        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 8        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 9        | 49.85         |
| (1,219) | 1:177:A:VAL:C | 1:178:A:ALA:N  | 1:178:A:ALA:CA | 1:178:A:ALA:C | 10       | 49.85         |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C    | 1:3:A:ALA:N   | 10       | 47.11         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 1        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 2        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 3        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 4        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 5        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 6        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 7        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 8        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 9        | 46.98         |
| (1,164) | 1:128:A:ASP:N | 1:128:A:ASP:CA | 1:128:A:ASP:C  | 1:129:A:ARG:N | 10       | 46.98         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 1        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 2        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 3        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 4        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 5        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 6        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 7        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 8        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 9        | 46.31         |
| (1,47)  | 1:36:A:GLU:C  | 1:37:A:LYS:N   | 1:37:A:LYS:CA  | 1:37:A:LYS:C  | 10       | 46.31         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 1        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 2        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 3        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 4        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 5        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 6        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 7        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 8        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 9        | 43.94         |
| (1,147) | 1:116:A:PRO:C | 1:117:A:ILE:N  | 1:117:A:ILE:CA | 1:117:A:ILE:C | 10       | 43.94         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N  | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 1        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N  | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 2        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N  | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 3        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N  | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 4        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N  | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 5        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N  | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 6        | 43.89         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 7        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 8        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 9        | 43.89         |
| (1,215) | 1:174:A:LEU:C | 1:175:A:GLU:N | 1:175:A:GLU:CA | 1:175:A:GLU:C | 10       | 43.89         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 1        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 2        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 3        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 4        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 5        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 6        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 7        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 8        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 9        | 42.23         |
| (1,191) | 1:149:A:ILE:C | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C | 10       | 42.23         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 1        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 2        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 3        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 4        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 5        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 6        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 7        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 8        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 9        | 38.39         |
| (1,75)  | 1:58:A:PRO:C  | 1:59:A:ILE:N  | 1:59:A:ILE:CA  | 1:59:A:ILE:C  | 10       | 38.39         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 1        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 2        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 3        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 4        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 5        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 6        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 7        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 8        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 9        | 36.53         |
| (1,49)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:LYS:N  | 1:38:A:LYS:CA  | 1:38:A:LYS:C  | 10       | 36.53         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 1        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 2        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 3        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 4        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 5        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 6        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 7        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 8        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 9        | 33.69         |
| (1,171) | 1:133:A:ALA:C | 1:134:A:LYS:N | 1:134:A:LYS:CA | 1:134:A:LYS:C | 10       | 33.69         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 1        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 2        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 3        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 4        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 5        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 6        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N  | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 7        | 32.96         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N   | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 8        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N   | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 9        | 32.96         |
| (1,45)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:PHE:N   | 1:35:A:PHE:CA  | 1:35:A:PHE:C  | 10       | 32.96         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 1        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 2        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 3        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 4        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 5        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 6        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 7        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 8        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 9        | 32.89         |
| (1,99)  | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:GLN:N   | 1:84:A:GLN:CA  | 1:84:A:GLN:C  | 10       | 32.89         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 1        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 2        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 3        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 4        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 5        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 6        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 7        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 8        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 9        | 30.13         |
| (1,175) | 1:136:A:ILE:C | 1:137:A:VAL:N  | 1:137:A:VAL:CA | 1:137:A:VAL:C | 10       | 30.13         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 1        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 2        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 3        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 4        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 5        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 6        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 7        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 8        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 9        | 27.28         |
| (1,107) | 1:89:A:MET:C  | 1:90:A:PHE:N   | 1:90:A:PHE:CA  | 1:90:A:PHE:C  | 10       | 27.28         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 1        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 2        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 3        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 4        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 5        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 6        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 7        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 8        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 9        | 25.81         |
| (1,21)  | 1:13:A:LEU:C  | 1:14:A:VAL:N   | 1:14:A:VAL:CA  | 1:14:A:VAL:C  | 10       | 25.81         |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C    | 1:3:A:ALA:N   | 3        | 25.79         |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA   | 1:2:A:ALA:C    | 1:3:A:ALA:N   | 9        | 25.13         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 1        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 2        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 3        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 4        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 5        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 6        | 24.22         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 7        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 8        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 9        | 24.22         |
| (1,266) | 1:211:A:ASP:N | 1:211:A:ASP:CA | 1:211:A:ASP:C  | 1:212:A:GLU:N | 10       | 24.22         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 1        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 2        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 3        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 4        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 5        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 6        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 7        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 8        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 9        | 23.24         |
| (1,231) | 1:187:A:VAL:C | 1:188:A:VAL:N  | 1:188:A:VAL:CA | 1:188:A:VAL:C | 10       | 23.24         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 1        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 2        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 3        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 4        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 5        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 6        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 7        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 8        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 9        | 21.83         |
| (1,225) | 1:181:A:ALA:C | 1:182:A:LEU:N  | 1:182:A:LEU:CA | 1:182:A:LEU:C | 10       | 21.83         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 1        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 2        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 3        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 4        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 5        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 6        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 7        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 8        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 9        | 21.38         |
| (1,165) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:LYS:N  | 1:130:A:LYS:CA | 1:130:A:LYS:C | 10       | 21.38         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 1        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 2        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 3        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 4        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 5        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 6        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 7        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 8        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 9        | 19.83         |
| (1,145) | 1:115:A:ILE:C | 1:116:A:PRO:N  | 1:116:A:PRO:CA | 1:116:A:PRO:C | 10       | 19.83         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 1        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 2        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 3        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 4        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 5        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 6        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N   | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 7        | 19.72         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 8        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 9        | 19.72         |
| (1,61)  | 1:49:A:PRO:C  | 1:50:A:LEU:N  | 1:50:A:LEU:CA  | 1:50:A:LEU:C  | 10       | 19.72         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 1        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 2        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 3        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 4        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 5        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 6        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 7        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 8        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 9        | 19.39         |
| (1,48)  | 1:37:A:LYS:N  | 1:37:A:LYS:CA | 1:37:A:LYS:C   | 1:38:A:LYS:N  | 10       | 19.39         |
| (1,2)   | 1:2:A:ALA:N   | 1:2:A:ALA:CA  | 1:2:A:ALA:C    | 1:3:A:ALA:N   | 7        | 19.3          |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 1        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 2        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 3        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 4        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 5        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 6        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 7        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 8        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 9        | 18.32         |
| (1,70)  | 1:55:A:ASN:N  | 1:55:A:ASN:CA | 1:55:A:ASN:C   | 1:56:A:ARG:N  | 10       | 18.32         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 1        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 2        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 3        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 4        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 5        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 6        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 7        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 8        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 9        | 18.05         |
| (1,68)  | 1:54:A:THR:N  | 1:54:A:THR:CA | 1:54:A:THR:C   | 1:55:A:ASN:N  | 10       | 18.05         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 1        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 2        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 3        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 4        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 5        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 6        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 7        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 8        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 9        | 17.88         |
| (1,149) | 1:117:A:ILE:C | 1:118:A:VAL:N | 1:118:A:VAL:CA | 1:118:A:VAL:C | 10       | 17.88         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 2        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 3        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 4        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 5        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 6        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 7        | 17.06         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 8        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 9        | 17.06         |
| (1,263) | 1:209:A:LEU:C | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 10       | 17.06         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 1        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 2        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 3        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 4        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 5        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 6        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 7        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 8        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 9        | 16.68         |
| (1,93)  | 1:76:A:ARG:C  | 1:77:A:ASP:N  | 1:77:A:ASP:CA  | 1:77:A:ASP:C  | 10       | 16.68         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 1        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 2        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 3        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 4        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 5        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 6        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 7        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 8        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 9        | 13.44         |
| (1,89)  | 1:70:A:GLU:C  | 1:71:A:LYS:N  | 1:71:A:LYS:CA  | 1:71:A:LYS:C  | 10       | 13.44         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 1        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 2        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 3        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 4        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 5        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 6        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 7        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 8        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 9        | 12.47         |
| (1,43)  | 1:33:A:GLY:C  | 1:34:A:GLU:N  | 1:34:A:GLU:CA  | 1:34:A:GLU:C  | 10       | 12.47         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 1        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 2        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 3        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 4        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 5        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 6        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 7        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 8        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 9        | 12.21         |
| (1,213) | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1:174:A:LEU:CA | 1:174:A:LEU:C | 10       | 12.21         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 1        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 2        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 3        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 4        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 5        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 6        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 7        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 8        | 10.93         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 9        | 10.93         |
| (1,66)  | 1:53:A:HIS:N  | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C   | 1:54:A:THR:N  | 10       | 10.93         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 1        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 2        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 3        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 4        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 5        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 6        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 7        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 8        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 9        | 10.83         |
| (1,192) | 1:150:A:SER:N | 1:150:A:SER:CA | 1:150:A:SER:C  | 1:151:A:ALA:N | 10       | 10.83         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 1        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 2        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 3        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 4        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 5        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 6        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 7        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 8        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 9        | 10.53         |
| (1,221) | 1:178:A:ALA:C | 1:179:A:MET:N  | 1:179:A:MET:CA | 1:179:A:MET:C | 10       | 10.53         |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 1        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 2        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 3        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 4        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 5        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 6        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 7        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 8        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 9        | 9.91          |
| (1,230) | 1:186:A:GLU:N | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C  | 1:187:A:VAL:N | 10       | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 2        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 3        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 4        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 5        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 6        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 7        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 8        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 9        | 9.91          |
| (1,25)  | 1:17:A:GLY:C  | 1:18:A:ASP:N   | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 10       | 9.91          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 1        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 2        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 3        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 4        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 5        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 6        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 7        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 8        | 8.54          |
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C  | 1:154:A:ASN:N | 9        | 8.54          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,196) | 1:153:A:SER:N | 1:153:A:SER:CA | 1:153:A:SER:C | 1:154:A:ASN:N | 10       | 8.54          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 1        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 2        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 3        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 4        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 5        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 6        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 7        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 8        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 9        | 7.97          |
| (1,33)  | 1:25:A:THR:C  | 1:26:A:PHE:N   | 1:26:A:PHE:CA | 1:26:A:PHE:C  | 10       | 7.97          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 1        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 2        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 3        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 4        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 5        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 6        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 7        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 8        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 9        | 7.42          |
| (1,264) | 1:210:A:PRO:N | 1:210:A:PRO:CA | 1:210:A:PRO:C | 1:211:A:ASP:N | 10       | 7.42          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 1        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 2        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 3        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 4        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 5        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 6        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 7        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 8        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 9        | 7.41          |
| (1,212) | 1:173:A:ASN:N | 1:173:A:ASN:CA | 1:173:A:ASN:C | 1:174:A:LEU:N | 10       | 7.41          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 1        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 2        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 3        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 4        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 5        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 6        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 7        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 8        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 9        | 7.01          |
| (1,86)  | 1:69:A:GLN:N  | 1:69:A:GLN:CA  | 1:69:A:GLN:C  | 1:70:A:GLU:N  | 10       | 7.01          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 1        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 2        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 3        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 4        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 5        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 6        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 7        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 8        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 9        | 6.56          |
| (1,53)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 10       | 6.56          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 1        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 2        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 3        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 4        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 5        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 6        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 7        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 8        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 9        | 6.03          |
| (1,229) | 1:185:A:PRO:C | 1:186:A:GLU:N  | 1:186:A:GLU:CA | 1:186:A:GLU:C | 10       | 6.03          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 1        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 2        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 3        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 4        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 5        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 6        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 7        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 8        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 9        | 5.94          |
| (1,80)  | 1:61:A:PHE:N  | 1:61:A:PHE:CA  | 1:61:A:PHE:C   | 1:62:A:ASN:N  | 10       | 5.94          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 2        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 3        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 4        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 5        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 6        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 7        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 8        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 9        | 5.62          |
| (1,201) | 1:158:A:GLU:C | 1:159:A:LYS:N  | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 10       | 5.62          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 1        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 2        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 3        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 4        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 5        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 6        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 7        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 8        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 9        | 5.48          |
| (1,254) | 1:204:A:ALA:N | 1:204:A:ALA:CA | 1:204:A:ALA:C  | 1:205:A:GLN:N | 10       | 5.48          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 1        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 2        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 3        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 4        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 5        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 6        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 7        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 8        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 9        | 5.44          |
| (1,9)   | 1:7:A:PRO:C   | 1:8:A:GLN:N    | 1:8:A:GLN:CA   | 1:8:A:GLN:C   | 10       | 5.44          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 1        | 5.01          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 2        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 3        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 4        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 5        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 6        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 7        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 8        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 9        | 5.01          |
| (1,65)  | 1:52:A:PHE:C  | 1:53:A:HIS:N   | 1:53:A:HIS:CA  | 1:53:A:HIS:C  | 10       | 5.01          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 1        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 2        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 3        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 4        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 5        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 6        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 7        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 8        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 9        | 4.86          |
| (1,69)  | 1:54:A:THR:C  | 1:55:A:ASN:N   | 1:55:A:ASN:CA  | 1:55:A:ASN:C  | 10       | 4.86          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 1        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 2        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 3        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 4        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 5        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 6        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 7        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 8        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 9        | 4.38          |
| (1,143) | 1:114:A:ASN:C | 1:115:A:ILE:N  | 1:115:A:ILE:CA | 1:115:A:ILE:C | 10       | 4.38          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 1        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 2        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 3        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 4        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 5        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 6        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 7        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 8        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 9        | 2.91          |
| (1,189) | 1:148:A:ASP:C | 1:149:A:ILE:N  | 1:149:A:ILE:CA | 1:149:A:ILE:C | 10       | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 1        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 2        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 3        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 4        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 5        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 6        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 7        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 8        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 9        | 2.91          |
| (1,142) | 1:112:A:CYS:N | 1:112:A:CYS:CA | 1:112:A:CYS:C  | 1:113:A:GLU:N | 10       | 2.91          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C   | 1:19:A:GLY:N  | 1        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C   | 1:19:A:GLY:N  | 2        | 2.88          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 3        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 4        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 5        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 6        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 7        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 8        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 9        | 2.88          |
| (1,26)  | 1:18:A:ASP:N  | 1:18:A:ASP:CA  | 1:18:A:ASP:C  | 1:19:A:GLY:N  | 10       | 2.88          |
| (1,3)   | 1:3:A:ALA:C   | 1:4:A:GLN:N    | 1:4:A:GLN:CA  | 1:4:A:GLN:C   | 8        | 2.01          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 1        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 2        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 3        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 4        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 5        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 6        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 7        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 8        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 9        | 1.81          |
| (1,202) | 1:159:A:LYS:N | 1:159:A:LYS:CA | 1:159:A:LYS:C | 1:160:A:PRO:N | 10       | 1.81          |