



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 26, 2026 – 02:59 PM UTC

PDB ID : 5OGU / pdb_00005ogu
BMRB ID : 34163
Title : Structure of DNA-binding HU protein from micoplasma Spiroplasma mel-
liferum
Authors : Altukhov, D.A.; Talyzina, A.A.; Agapova, Y.K.; Vlaskina, A.V.; Ko-
rzhenevskiy, D.A.; Bocharov, E.V.; Rakitina, T.V.; Timofeev, V.I.
Deposited on : 2017-07-13

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) 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

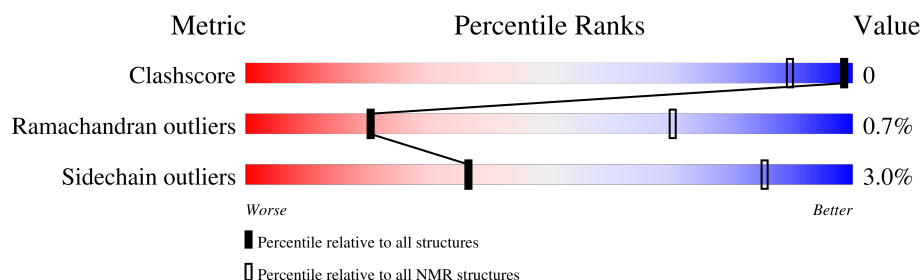
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 12%.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	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 ≥ 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	95	
1	B	95	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:-1-A:55, A:77-A:93, B:-1-B:55, B:77-B:93 (148)	0.79	4
2	B:58-B:76 (19)	0.68	6

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, 3, 4, 5, 6, 7
2	8, 9, 10, 11, 12, 13, 14
Single-model clusters	15

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2948 atoms, of which 1500 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DNA-binding protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	95	Total	C	H	N	O	S	0
			1474	456	750	130	137	1	
1	B	95	Total	C	H	N	O	S	0
			1474	456	750	130	137	1	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

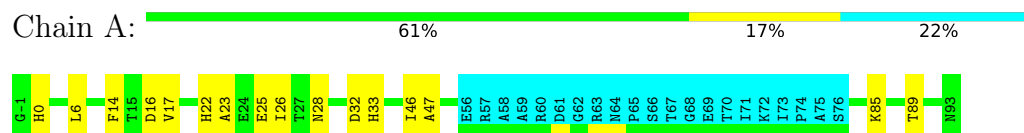
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-1	GLY	-	expression tag	UNP A0A037USE5
A	0	HIS	-	expression tag	UNP A0A037USE5
B	-1	GLY	-	expression tag	UNP A0A037USE5
B	0	HIS	-	expression tag	UNP A0A037USE5

4 Residue-property plots [i](#)

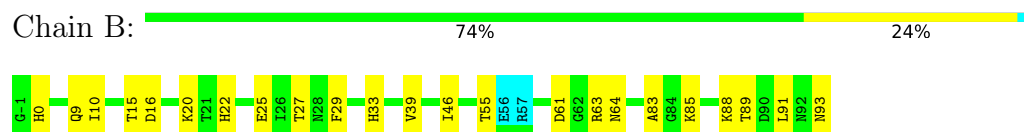
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: DNA-binding protein



- Molecule 1: DNA-binding protein

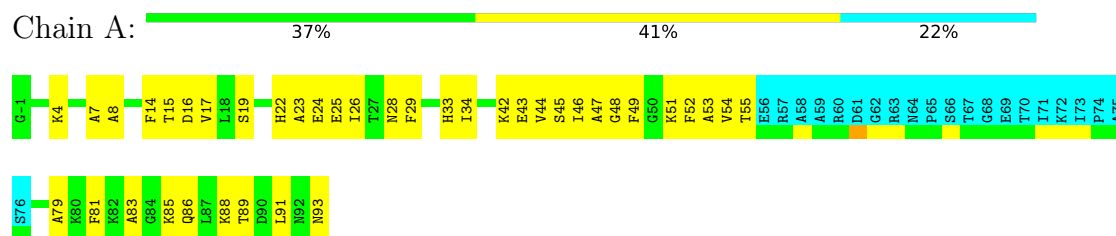


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: DNA-binding protein



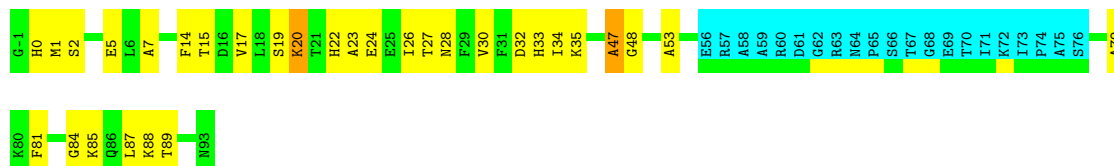
- Molecule 1: DNA-binding protein





4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: DNA-binding protein

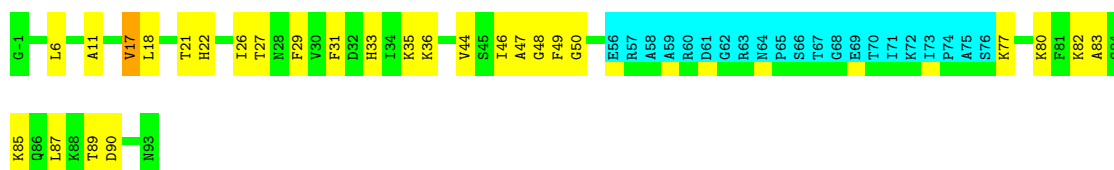


- Molecule 1: DNA-binding protein



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: DNA-binding protein



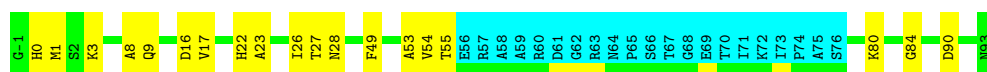
- Molecule 1: DNA-binding protein



4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: DNA-binding protein





- Molecule 1: DNA-binding protein

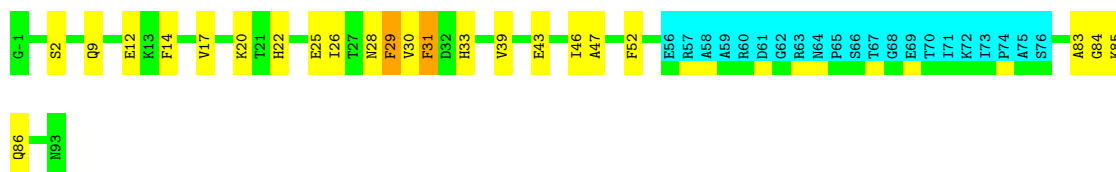
Chain B: 65% 33% .



4.2.5 Score per residue for model 5

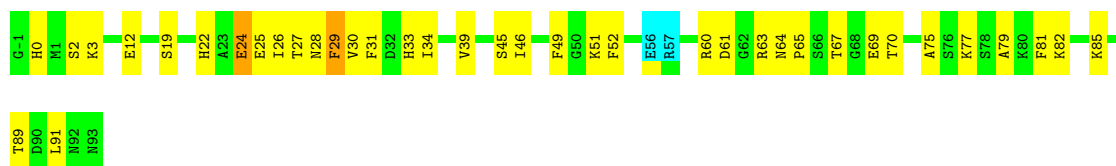
- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain A: 54% 22% . 22%



- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain B: 58% 38% . .



4.2.6 Score per residue for model 6

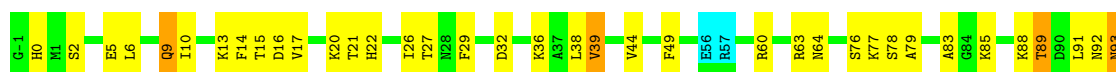
- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain A: 51% 26% . 22%



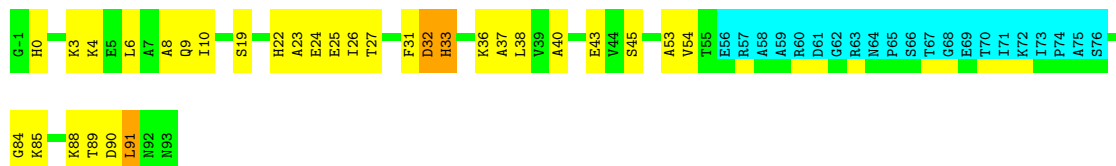
- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain B: 59% 35% . .



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DNA-binding protein

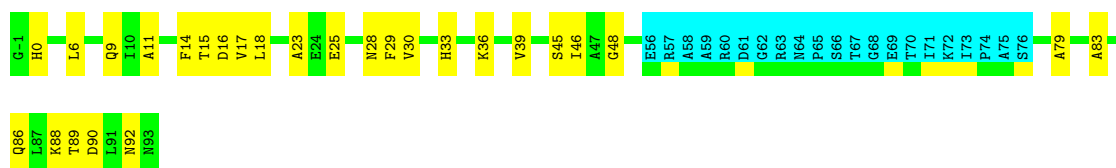


- Molecule 1: DNA-binding protein



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DNA-binding protein



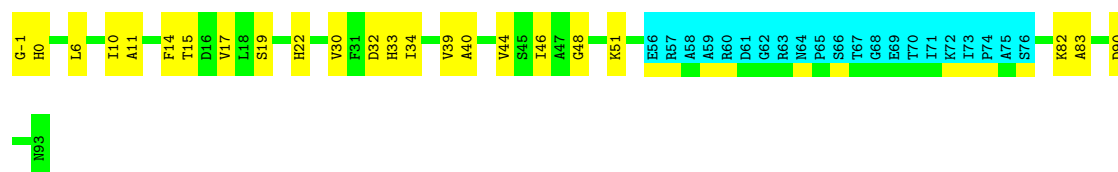
- Molecule 1: DNA-binding protein



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DNA-binding protein





- Molecule 1: DNA-binding protein

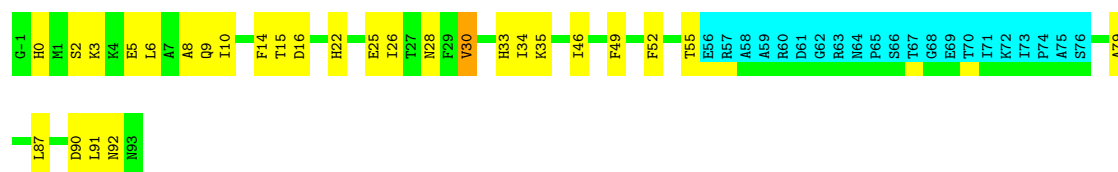
Chain B: 62% 36%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain A: 48% 28% 22%



- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain B: 67% 29%



4.2.11 Score per residue for model 11

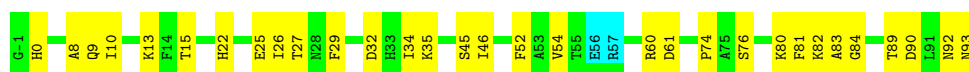
- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain A: 43% 33% 22%



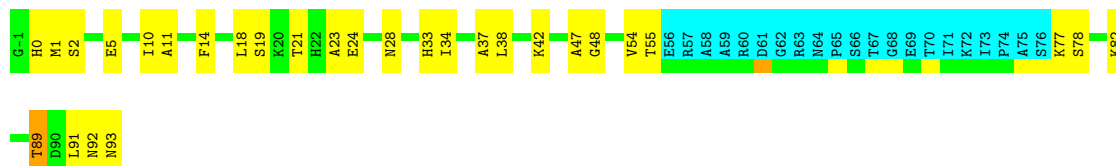
- Molecule 1: DNA-binding protein

Chain B: 65% 33%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: DNA-binding protein

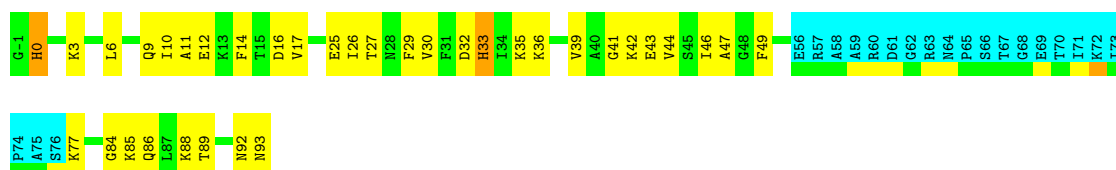


- Molecule 1: DNA-binding protein

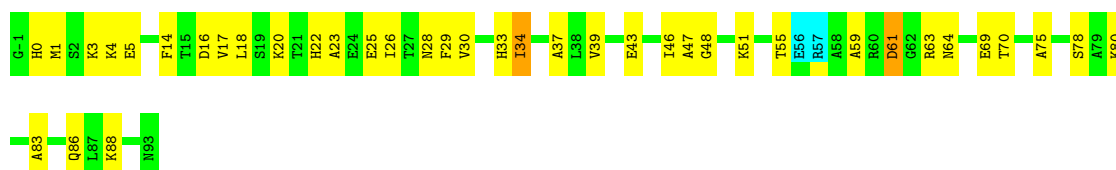


4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: DNA-binding protein

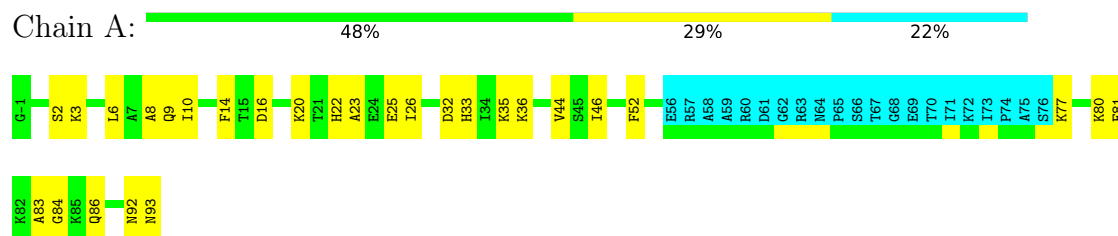


- Molecule 1: DNA-binding protein

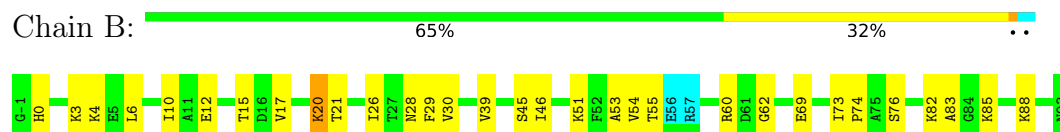


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: DNA-binding protein

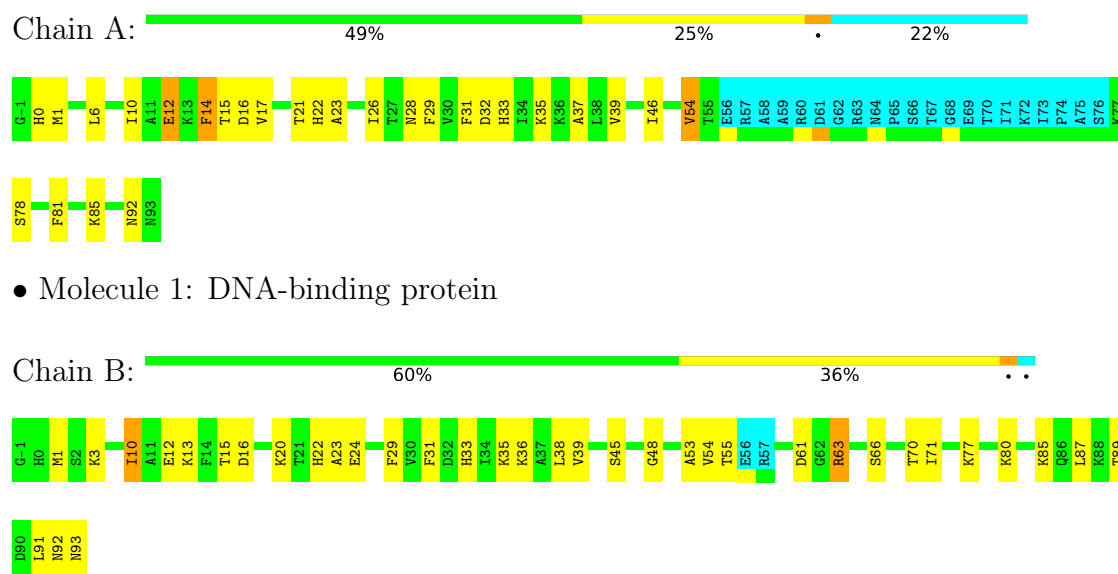


- Molecule 1: DNA-binding protein



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: DNA-binding protein



- Molecule 1: DNA-binding protein

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 5000 calculated structures, 15 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
GROMACS	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	320
Number of shifts mapped to atoms	320
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	12%

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	0.57±0.02	0±0/577 (0.0± 0.0%)	2.53±0.09	44±7/767 (5.7± 0.9%)
1	B	0.59±0.01	0±0/714 (0.0± 0.0%)	2.50±0.07	50±8/953 (5.2± 0.8%)
All	All	0.58	0/19365 (0.0%)	2.52	1409/25800 (5.5%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	B	0.0±0.0	0.7±1.1
1	A	0.0±0.0	0.6±0.9
All	All	0	20

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	47	ALA	CA-C-N	12.64	138.49	123.44	1	3
1	A	47	ALA	C-N-CA	12.64	138.49	123.44	1	3
1	A	89	THR	N-CA-C	11.45	126.34	112.38	1	1
1	B	16	ASP	CA-CB-CG	10.53	123.13	112.60	9	4
1	A	16	ASP	CA-CB-CG	10.45	123.05	112.60	11	6
1	B	60	ARG	CA-C-N	10.37	138.86	122.59	14	2
1	B	60	ARG	C-N-CA	10.37	138.86	122.59	14	2
1	A	28	ASN	CA-C-N	10.34	136.33	120.82	5	6
1	A	28	ASN	C-N-CA	10.34	136.33	120.82	5	6
1	A	22	HIS	ND1-CE1-NE2	10.31	118.71	108.40	4	9
1	B	69	GLU	CA-C-N	10.13	135.19	120.90	5	1
1	B	69	GLU	C-N-CA	10.13	135.19	120.90	5	1
1	A	44	VAL	CA-C-N	10.09	136.64	122.72	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	44	VAL	C-N-CA	10.09	136.64	122.72	1	2
1	B	63	ARG	NE-CZ-NH2	9.97	128.17	119.20	6	3
1	A	88	LYS	CA-C-N	9.78	134.36	120.28	7	4
1	A	88	LYS	C-N-CA	9.78	134.36	120.28	7	4
1	A	81	PHE	CA-CB-CG	9.65	123.45	113.80	2	2
1	B	54	VAL	CA-C-N	9.64	137.66	122.62	10	3
1	B	54	VAL	C-N-CA	9.64	137.66	122.62	10	3
1	A	43	GLU	CA-C-N	9.59	134.47	122.48	7	2
1	A	43	GLU	C-N-CA	9.59	134.47	122.48	7	2
1	B	81	PHE	CA-C-N	9.50	134.62	121.33	2	1
1	B	81	PHE	C-N-CA	9.50	134.62	121.33	2	1
1	B	46	ILE	CA-C-O	-9.50	111.02	121.09	13	1
1	B	25	GLU	CA-C-N	9.35	133.72	120.53	7	5
1	B	25	GLU	C-N-CA	9.35	133.72	120.53	7	5
1	A	92	ASN	CA-CB-CG	9.29	121.89	112.60	13	3
1	A	84	GLY	CA-C-N	9.29	132.72	120.28	7	6
1	A	84	GLY	C-N-CA	9.29	132.72	120.28	7	6
1	A	32	ASP	CA-C-N	9.24	132.66	120.28	11	5
1	A	32	ASP	C-N-CA	9.24	132.66	120.28	11	5
1	A	36	LYS	CA-C-N	9.18	132.38	120.44	8	4
1	A	36	LYS	C-N-CA	9.18	132.38	120.44	8	4
1	A	32	ASP	CA-CB-CG	9.15	121.75	112.60	14	3
1	A	21	THR	CA-CB-CG2	9.13	126.02	110.50	12	1
1	B	83	ALA	CA-C-N	9.09	130.26	122.17	8	3
1	B	83	ALA	C-N-CA	9.09	130.26	122.17	8	3
1	A	31	PHE	CA-C-N	9.09	133.00	120.63	5	4
1	A	31	PHE	C-N-CA	9.09	133.00	120.63	5	4
1	B	38	LEU	CA-C-N	8.99	131.94	120.70	1	2
1	B	38	LEU	C-N-CA	8.99	131.94	120.70	1	2
1	A	33	HIS	CA-CB-CG	8.95	122.75	113.80	12	6
1	B	64	ASN	N-CA-C	-8.93	98.55	109.72	2	1
1	A	26	ILE	CA-C-O	-8.91	111.68	120.95	2	2
1	B	92	ASN	CA-CB-CG	8.87	121.47	112.60	3	3
1	A	23	ALA	CA-C-N	8.81	131.90	120.44	4	6
1	A	23	ALA	C-N-CA	8.81	131.90	120.44	4	6
1	B	76	SER	CB-CA-C	8.73	122.98	110.24	6	2
1	B	45	SER	CA-C-N	8.70	133.74	122.95	4	4
1	B	45	SER	C-N-CA	8.70	133.74	122.95	4	4
1	B	22	HIS	CE1-NE2-CD2	-8.70	100.30	109.00	12	3
1	A	14	PHE	CA-C-N	8.69	133.06	120.38	13	7
1	A	14	PHE	C-N-CA	8.69	133.06	120.38	13	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	26	ILE	CA-C-N	8.68	132.27	120.38	4	7
1	A	26	ILE	C-N-CA	8.68	132.27	120.38	4	7
1	A	33	HIS	ND1-CG-CD2	8.68	114.78	106.10	8	2
1	B	0	HIS	CA-CB-CG	8.64	122.44	113.80	14	5
1	B	69	GLU	CA-C-O	-8.63	110.89	120.81	9	1
1	A	19	SER	CA-C-N	8.62	132.20	120.38	11	6
1	A	19	SER	C-N-CA	8.62	132.20	120.38	11	6
1	A	49	PHE	CA-CB-CG	8.59	122.39	113.80	4	5
1	A	8	ALA	N-CA-C	8.55	121.55	111.71	10	2
1	A	0	HIS	CA-CB-CG	8.53	122.33	113.80	8	4
1	B	51	LYS	CA-C-N	8.46	134.93	123.00	1	3
1	B	51	LYS	C-N-CA	8.46	134.93	123.00	1	3
1	B	22	HIS	ND1-CE1-NE2	8.43	116.83	108.40	12	5
1	B	64	ASN	CA-C-N	8.42	128.12	119.19	5	5
1	B	64	ASN	C-N-CA	8.42	128.12	119.19	5	5
1	A	3	LYS	N-CA-C	8.37	122.92	112.87	4	3
1	A	52	PHE	CA-CB-CG	8.37	122.17	113.80	10	3
1	B	49	PHE	CA-CB-CG	8.29	122.09	113.80	9	4
1	B	86	GLN	OE1-CD-NE2	-8.24	114.36	122.60	12	1
1	A	17	VAL	N-CA-C	-8.22	105.13	111.62	9	4
1	A	5	GLU	CA-C-N	8.20	131.10	120.44	11	1
1	A	5	GLU	C-N-CA	8.20	131.10	120.44	11	1
1	A	25	GLU	CA-C-N	8.19	131.17	120.60	6	7
1	A	25	GLU	C-N-CA	8.19	131.17	120.60	6	7
1	B	13	LYS	CA-C-O	-8.19	111.87	120.55	8	2
1	A	10	ILE	CA-C-N	8.15	131.03	120.44	9	1
1	A	10	ILE	C-N-CA	8.15	131.03	120.44	9	1
1	A	16	ASP	CA-C-N	8.13	130.81	120.88	10	2
1	A	16	ASP	C-N-CA	8.13	130.81	120.88	10	2
1	B	90	ASP	CA-C-N	8.07	130.93	120.44	10	1
1	B	90	ASP	C-N-CA	8.07	130.93	120.44	10	1
1	A	6	LEU	CA-C-N	8.04	131.06	120.28	10	7
1	A	6	LEU	C-N-CA	8.04	131.06	120.28	10	7
1	B	64	ASN	CA-CB-CG	8.04	120.64	112.60	6	3
1	B	27	THR	CA-CB-OG1	8.04	121.66	109.60	10	1
1	A	17	VAL	CB-CA-C	7.98	118.16	111.05	9	1
1	A	84	GLY	O-C-N	-7.98	116.65	123.59	13	1
1	A	33	HIS	CB-CG-CD2	-7.96	120.85	131.20	13	1
1	B	68	GLY	CA-C-N	7.96	132.09	120.95	9	3
1	B	68	GLY	C-N-CA	7.96	132.09	120.95	9	3
1	A	28	ASN	CA-CB-CG	7.95	120.55	112.60	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	30	VAL	CA-C-N	7.94	131.71	120.28	8	2
1	A	30	VAL	C-N-CA	7.94	131.71	120.28	8	2
1	B	70	THR	CA-CB-OG1	7.90	121.45	109.60	13	2
1	A	15	THR	CA-CB-CG2	7.89	123.91	110.50	15	5
1	A	21	THR	CA-C-N	7.88	131.16	120.44	3	1
1	A	21	THR	C-N-CA	7.88	131.16	120.44	3	1
1	B	0	HIS	CA-C-N	7.78	135.03	122.81	7	4
1	B	0	HIS	C-N-CA	7.78	135.03	122.81	7	4
1	A	83	ALA	CA-C-N	7.76	131.21	122.67	5	6
1	A	83	ALA	C-N-CA	7.76	131.21	122.67	5	6
1	B	20	LYS	N-CA-C	7.76	120.72	111.33	8	3
1	B	84	GLY	CA-C-N	7.72	130.63	120.28	4	4
1	B	84	GLY	C-N-CA	7.72	130.63	120.28	4	4
1	B	17	VAL	CB-CA-C	7.72	117.92	111.05	13	2
1	B	13	LYS	N-CA-C	-7.71	102.51	112.23	2	2
1	B	42	LYS	CA-C-N	7.71	132.67	122.42	9	3
1	B	42	LYS	C-N-CA	7.71	132.67	122.42	9	3
1	B	24	GLU	CA-C-N	7.70	130.91	120.44	5	2
1	B	24	GLU	C-N-CA	7.70	130.91	120.44	5	2
1	B	83	ALA	O-C-N	-7.69	114.09	122.85	8	2
1	A	22	HIS	CA-C-N	7.68	130.91	120.38	10	3
1	A	22	HIS	C-N-CA	7.68	130.91	120.38	10	3
1	B	36	LYS	N-CA-C	7.68	120.62	111.33	6	2
1	B	5	GLU	CA-C-N	7.68	131.19	120.29	6	5
1	B	5	GLU	C-N-CA	7.68	131.19	120.29	6	5
1	B	8	ALA	N-CA-C	7.63	121.85	112.23	11	1
1	B	2	SER	CA-C-N	7.63	132.80	120.60	10	4
1	B	2	SER	C-N-CA	7.63	132.80	120.60	10	4
1	B	19	SER	CA-C-N	7.59	136.04	121.54	3	3
1	B	19	SER	C-N-CA	7.59	136.04	121.54	3	3
1	B	29	PHE	CA-C-O	-7.57	111.73	120.20	13	3
1	B	46	ILE	O-C-N	7.56	129.86	122.30	13	1
1	A	33	HIS	ND1-CE1-NE2	7.55	115.95	108.40	1	3
1	B	33	HIS	CA-C-N	7.54	130.32	120.60	5	2
1	B	33	HIS	C-N-CA	7.54	130.32	120.60	5	2
1	B	1	MET	CA-C-N	7.47	134.32	122.59	10	1
1	B	1	MET	C-N-CA	7.47	134.32	122.59	10	1
1	B	6	LEU	CA-C-N	7.45	130.57	120.44	4	2
1	B	6	LEU	C-N-CA	7.45	130.57	120.44	4	2
1	A	5	GLU	CA-CB-CG	7.44	128.99	114.10	10	1
1	B	46	ILE	CA-CB-CG1	7.43	123.04	110.40	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	68	GLY	O-C-N	-7.43	116.77	122.71	8	1
1	B	79	ALA	N-CA-C	7.38	120.63	109.41	7	1
1	B	78	SER	CA-C-N	7.37	134.15	122.36	1	1
1	B	78	SER	C-N-CA	7.37	134.15	122.36	1	1
1	B	63	ARG	CB-CA-C	7.36	123.02	109.70	9	3
1	A	47	ALA	CA-C-O	-7.35	112.86	120.80	11	2
1	A	35	LYS	CA-C-O	-7.35	112.76	120.55	10	3
1	A	93	ASN	CA-CB-CG	7.34	119.94	112.60	1	3
1	B	15	THR	N-CA-C	7.34	120.21	111.33	4	3
1	B	15	THR	CA-CB-OG1	7.33	120.59	109.60	12	2
1	B	33	HIS	ND1-CE1-NE2	7.33	115.73	108.40	9	6
1	A	46	ILE	CA-CB-CG1	7.33	122.85	110.40	1	4
1	B	6	LEU	CA-C-O	-7.32	113.16	120.70	9	1
1	B	65	PRO	N-CA-CB	7.32	111.28	103.52	5	1
1	B	59	ALA	CA-C-N	7.31	134.07	121.64	4	3
1	B	59	ALA	C-N-CA	7.31	134.07	121.64	4	3
1	B	12	GLU	N-CA-C	-7.31	104.51	113.50	5	1
1	A	22	HIS	CA-CB-CG	7.30	121.10	113.80	6	1
1	B	88	LYS	CA-C-N	7.26	130.60	120.29	7	6
1	B	88	LYS	C-N-CA	7.26	130.60	120.29	7	6
1	B	55	THR	CA-C-N	7.25	134.84	122.37	14	1
1	B	55	THR	C-N-CA	7.25	134.84	122.37	14	1
1	B	27	THR	CA-C-N	7.23	130.56	120.29	8	3
1	B	27	THR	C-N-CA	7.23	130.56	120.29	8	3
1	B	5	GLU	CB-CG-CD	7.21	124.85	112.60	7	2
1	B	26	ILE	CA-C-O	-7.20	113.47	120.95	14	3
1	A	82	LYS	N-CA-CB	-7.20	98.35	110.80	3	1
1	A	14	PHE	CA-CB-CG	7.19	120.99	113.80	9	3
1	B	85	LYS	CA-C-N	7.19	130.24	120.54	14	4
1	B	85	LYS	C-N-CA	7.19	130.24	120.54	14	4
1	B	34	ILE	CA-C-N	7.18	130.13	120.65	11	3
1	B	34	ILE	C-N-CA	7.18	130.13	120.65	11	3
1	A	55	THR	CB-CA-C	7.16	124.47	109.79	12	1
1	A	12	GLU	O-C-N	-7.16	113.04	122.42	13	1
1	B	9	GLN	CB-CG-CD	7.12	124.71	112.60	8	1
1	B	30	VAL	N-CA-CB	-7.12	102.22	110.55	14	1
1	A	30	VAL	N-CA-C	-7.11	104.83	111.45	9	2
1	B	32	ASP	CA-C-O	-7.11	110.63	119.38	11	2
1	B	36	LYS	CA-C-N	7.08	130.34	120.29	2	1
1	B	36	LYS	C-N-CA	7.08	130.34	120.29	2	1
1	B	80	LYS	CA-C-N	7.07	133.18	122.93	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	80	LYS	C-N-CA	7.07	133.18	122.93	15	1
1	B	14	PHE	CA-C-N	7.07	130.06	120.38	4	6
1	B	14	PHE	C-N-CA	7.07	130.06	120.38	4	6
1	B	83	ALA	N-CA-C	7.07	120.20	110.24	14	1
1	A	27	THR	CA-C-O	-7.06	113.07	120.55	3	2
1	B	37	ALA	CA-C-N	7.03	129.93	120.65	13	4
1	B	37	ALA	C-N-CA	7.03	129.93	120.65	13	4
1	B	4	LYS	CA-C-N	7.03	130.99	120.31	13	3
1	B	4	LYS	C-N-CA	7.03	130.99	120.31	13	3
1	B	58	ALA	CB-CA-C	-7.01	97.56	109.83	4	1
1	A	2	SER	N-CA-CB	-7.01	100.42	110.44	12	2
1	A	9	GLN	CA-C-N	7.00	130.41	120.53	8	3
1	A	9	GLN	C-N-CA	7.00	130.41	120.53	8	3
1	B	60	ARG	CB-CA-C	7.00	120.52	110.79	9	2
1	B	55	THR	CA-CB-OG1	6.99	120.08	109.60	9	3
1	A	0	HIS	CA-C-N	6.98	133.49	122.74	13	1
1	A	0	HIS	C-N-CA	6.98	133.49	122.74	13	1
1	A	48	GLY	CA-C-N	6.97	129.92	120.44	9	2
1	A	48	GLY	C-N-CA	6.97	129.92	120.44	9	2
1	B	81	PHE	CA-CB-CG	6.96	120.77	113.80	1	4
1	B	66	SER	N-CA-C	6.96	118.87	111.28	2	1
1	B	84	GLY	O-C-N	6.95	129.64	123.59	2	1
1	B	29	PHE	N-CA-C	6.95	119.74	111.33	15	2
1	B	46	ILE	CB-CA-C	6.94	121.03	111.31	1	4
1	A	38	LEU	N-CA-CB	6.94	120.08	110.01	7	1
1	B	52	PHE	CA-CB-CG	6.92	120.72	113.80	5	3
1	B	16	ASP	CA-C-N	6.92	130.49	123.16	13	1
1	B	16	ASP	C-N-CA	6.92	130.49	123.16	13	1
1	A	92	ASN	CA-C-N	6.91	134.14	121.70	10	3
1	A	92	ASN	C-N-CA	6.91	134.14	121.70	10	3
1	A	34	ILE	N-CA-C	-6.90	104.03	113.00	2	2
1	B	51	LYS	CB-CA-C	6.90	121.53	109.80	13	2
1	B	39	VAL	CA-C-N	6.89	129.51	120.28	7	3
1	B	39	VAL	C-N-CA	6.89	129.51	120.28	7	3
1	B	0	HIS	ND1-CE1-NE2	6.87	115.27	108.40	12	5
1	B	52	PHE	CA-C-N	6.87	134.00	121.85	11	2
1	B	52	PHE	C-N-CA	6.87	134.00	121.85	11	2
1	B	22	HIS	CA-C-N	6.86	130.40	120.38	7	4
1	B	22	HIS	C-N-CA	6.86	130.40	120.38	7	4
1	B	61	ASP	CA-CB-CG	6.86	119.46	112.60	5	3
1	A	20	LYS	CA-C-N	6.85	130.02	120.29	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	20	LYS	C-N-CA	6.85	130.02	120.29	5	1
1	A	0	HIS	ND1-CE1-NE2	6.84	115.24	108.40	10	6
1	A	18	LEU	N-CA-C	6.83	120.64	109.85	12	1
1	B	93	ASN	CA-CB-CG	6.82	119.42	112.60	11	3
1	B	91	LEU	CA-C-N	6.81	131.60	121.72	4	3
1	B	91	LEU	C-N-CA	6.81	131.60	121.72	4	3
1	B	74	PRO	CA-C-N	6.81	131.24	121.50	14	2
1	B	74	PRO	C-N-CA	6.81	131.24	121.50	14	2
1	B	60	ARG	CD-NE-CZ	6.80	133.92	124.40	11	2
1	B	17	VAL	CA-C-O	-6.79	112.29	120.78	6	1
1	B	21	THR	CA-C-N	6.79	129.70	120.54	1	4
1	B	21	THR	C-N-CA	6.79	129.70	120.54	1	4
1	B	76	SER	N-CA-C	6.78	120.09	108.02	10	1
1	A	80	LYS	CA-C-N	6.77	133.71	122.33	4	3
1	A	80	LYS	C-N-CA	6.77	133.71	122.33	4	3
1	A	9	GLN	OE1-CD-NE2	-6.77	115.83	122.60	4	4
1	B	12	GLU	O-C-N	-6.77	112.32	122.20	14	1
1	A	27	THR	CA-C-N	6.76	129.57	120.65	4	4
1	A	27	THR	C-N-CA	6.76	129.57	120.65	4	4
1	B	22	HIS	CB-CG-CD2	-6.74	122.44	131.20	7	2
1	A	86	GLN	CA-C-O	6.74	127.71	120.10	1	2
1	B	33	HIS	CE1-NE2-CD2	-6.74	102.26	109.00	2	1
1	A	30	VAL	CA-CB-CG1	6.74	121.86	110.40	10	1
1	B	73	ILE	CA-C-N	6.74	126.91	120.31	8	2
1	B	73	ILE	C-N-CA	6.74	126.91	120.31	8	2
1	A	85	LYS	CA-C-O	-6.73	112.66	120.20	15	2
1	B	33	HIS	CA-CB-CG	6.73	120.53	113.80	8	4
1	A	87	LEU	O-C-N	-6.73	113.99	122.26	2	1
1	B	30	VAL	N-CA-C	6.72	116.88	110.42	14	2
1	B	90	ASP	N-CA-C	-6.71	105.00	113.72	8	1
1	A	40	ALA	N-CA-CB	-6.70	99.98	110.44	7	2
1	B	85	LYS	CA-C-O	-6.70	113.42	120.92	5	2
1	B	80	LYS	N-CA-C	-6.69	99.31	109.95	11	2
1	B	74	PRO	N-CA-C	6.69	120.59	111.22	12	1
1	B	50	GLY	N-CA-C	6.69	120.28	111.52	10	1
1	A	17	VAL	CA-CB-CG1	6.68	121.75	110.40	4	4
1	A	8	ALA	CA-C-N	6.67	129.71	120.63	4	2
1	A	8	ALA	C-N-CA	6.67	129.71	120.63	4	2
1	A	34	ILE	CA-C-N	6.67	129.21	120.28	9	2
1	A	34	ILE	C-N-CA	6.67	129.21	120.28	9	2
1	B	62	GLY	CA-C-N	6.66	133.00	122.74	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	62	GLY	C-N-CA	6.66	133.00	122.74	9	3
1	A	54	VAL	CA-C-N	6.66	133.82	122.37	4	4
1	A	54	VAL	C-N-CA	6.66	133.82	122.37	4	4
1	B	14	PHE	CA-CB-CG	6.65	120.45	113.80	10	3
1	A	33	HIS	CA-C-N	6.62	129.14	120.60	15	3
1	A	33	HIS	C-N-CA	6.62	129.14	120.60	15	3
1	A	22	HIS	CE1-NE2-CD2	-6.61	102.39	109.00	4	6
1	B	39	VAL	N-CA-C	6.61	120.29	111.17	13	4
1	A	89	THR	CB-CA-C	6.60	122.83	110.63	7	1
1	B	46	ILE	N-CA-CB	-6.59	106.06	112.65	8	2
1	B	88	LYS	CB-CA-C	6.59	123.54	110.42	13	2
1	B	79	ALA	CA-C-O	6.59	128.89	121.51	1	2
1	B	58	ALA	CA-C-N	6.57	130.04	120.71	12	1
1	B	58	ALA	C-N-CA	6.57	130.04	120.71	12	1
1	B	3	LYS	CA-C-N	6.55	129.72	120.28	5	5
1	B	3	LYS	C-N-CA	6.55	129.72	120.28	5	5
1	B	8	ALA	CA-C-N	6.55	129.90	120.79	10	1
1	B	8	ALA	C-N-CA	6.55	129.90	120.79	10	1
1	A	29	PHE	CA-CB-CG	6.55	120.35	113.80	1	3
1	A	79	ALA	CA-C-N	6.55	132.84	122.62	6	2
1	A	79	ALA	C-N-CA	6.55	132.84	122.62	6	2
1	B	7	ALA	CA-C-N	6.54	129.70	120.28	1	1
1	B	7	ALA	C-N-CA	6.54	129.70	120.28	1	1
1	B	18	LEU	CA-C-O	6.53	127.55	120.43	13	1
1	A	78	SER	CB-CA-C	6.53	124.06	109.56	15	1
1	A	85	LYS	CA-C-N	6.47	129.60	120.28	1	2
1	A	85	LYS	C-N-CA	6.47	129.60	120.28	1	2
1	A	28	ASN	CA-C-O	-6.46	114.21	121.00	4	1
1	B	29	PHE	CA-C-N	6.46	128.78	120.70	12	5
1	B	29	PHE	C-N-CA	6.46	128.78	120.70	12	5
1	B	9	GLN	N-CA-C	6.46	118.01	110.97	2	1
1	B	53	ALA	CA-C-O	-6.45	114.11	121.40	14	1
1	A	46	ILE	CB-CA-C	6.44	118.23	111.09	13	4
1	B	15	THR	CA-C-N	6.44	129.43	120.29	10	3
1	B	15	THR	C-N-CA	6.44	129.43	120.29	10	3
1	A	34	ILE	O-C-N	-6.42	115.62	121.91	9	1
1	B	87	LEU	N-CA-CB	-6.42	101.00	110.49	15	1
1	B	29	PHE	CA-CB-CG	6.41	120.20	113.80	13	2
1	B	19	SER	CB-CA-C	6.40	122.76	109.38	4	2
1	B	9	GLN	CA-C-N	6.38	130.77	120.30	1	3
1	B	9	GLN	C-N-CA	6.38	130.77	120.30	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	92	ASN	OD1-CG-ND2	-6.38	116.22	122.60	10	2
1	A	26	ILE	CA-CB-CG1	6.38	121.25	110.40	11	1
1	A	41	GLY	CA-C-O	6.38	126.13	118.86	13	2
1	A	33	HIS	O-C-N	6.37	128.87	122.12	11	3
1	B	9	GLN	O-C-N	-6.36	115.52	122.07	1	1
1	B	62	GLY	CA-C-O	-6.36	115.84	122.01	14	1
1	B	12	GLU	CA-C-N	6.35	129.27	120.63	14	3
1	B	12	GLU	C-N-CA	6.35	129.27	120.63	14	3
1	B	0	HIS	N-CA-C	6.35	119.46	110.50	3	1
1	A	85	LYS	N-CA-C	6.35	119.01	111.33	2	4
1	B	0	HIS	N-CA-CB	-6.35	100.64	110.29	12	1
1	B	47	ALA	CA-C-N	6.34	133.84	121.41	3	3
1	B	47	ALA	C-N-CA	6.34	133.84	121.41	3	3
1	A	10	ILE	O-C-N	-6.34	115.30	121.83	12	3
1	A	31	PHE	CA-CB-CG	-6.30	107.50	113.80	7	2
1	A	0	HIS	O-C-N	-6.30	115.58	123.01	2	1
1	B	27	THR	CA-CB-CG2	6.29	121.20	110.50	8	5
1	A	28	ASN	OD1-CG-ND2	-6.29	116.31	122.60	8	3
1	B	70	THR	N-CA-C	6.29	119.47	110.10	1	1
1	B	48	GLY	CA-C-N	6.28	131.20	120.71	3	3
1	B	48	GLY	C-N-CA	6.28	131.20	120.71	3	3
1	A	53	ALA	CA-C-N	6.28	129.52	120.98	6	3
1	A	53	ALA	C-N-CA	6.28	129.52	120.98	6	3
1	B	17	VAL	O-C-N	6.25	128.73	122.04	12	2
1	A	19	SER	CB-CA-C	6.25	122.60	109.79	9	1
1	B	88	LYS	CA-CB-CG	6.25	126.60	114.10	12	1
1	B	30	VAL	CA-C-N	6.24	128.64	120.28	5	1
1	B	30	VAL	C-N-CA	6.24	128.64	120.28	5	1
1	B	37	ALA	N-CA-C	6.24	117.75	111.07	7	1
1	A	83	ALA	N-CA-C	6.24	119.30	110.50	8	2
1	B	6	LEU	O-C-N	6.24	128.83	122.09	9	1
1	A	91	LEU	CA-C-N	6.22	129.70	120.87	12	2
1	A	91	LEU	C-N-CA	6.22	129.70	120.87	12	2
1	A	11	ALA	CA-C-N	6.20	131.99	121.14	8	2
1	A	11	ALA	C-N-CA	6.20	131.99	121.14	8	2
1	A	0	HIS	ND1-CG-CD2	6.20	112.30	106.10	11	1
1	B	89	THR	N-CA-C	6.19	118.82	111.33	1	2
1	A	33	HIS	CE1-NE2-CD2	-6.18	102.82	109.00	10	2
1	A	46	ILE	N-CA-CB	-6.18	104.23	111.83	15	3
1	B	82	LYS	N-CA-C	-6.15	97.25	108.02	9	2
1	A	77	LYS	CA-C-N	6.14	133.06	121.69	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	77	LYS	C-N-CA	6.14	133.06	121.69	14	2
1	B	66	SER	N-CA-CB	-6.13	101.39	110.53	15	1
1	A	14	PHE	CB-CA-C	6.13	119.31	111.40	11	1
1	B	54	VAL	CA-CB-CG2	6.13	120.82	110.40	9	1
1	B	15	THR	CA-CB-CG2	6.10	120.88	110.50	11	2
1	A	91	LEU	N-CA-C	-6.10	105.49	113.12	10	1
1	A	35	LYS	N-CA-C	6.10	117.59	111.07	15	2
1	B	74	PRO	N-CD-CG	6.10	112.35	103.20	14	1
1	B	13	LYS	CA-C-N	6.10	132.25	123.17	15	3
1	B	13	LYS	C-N-CA	6.10	132.25	123.17	15	3
1	A	17	VAL	CA-C-O	-6.09	115.52	120.70	5	1
1	A	35	LYS	CA-C-N	6.08	129.56	120.31	6	3
1	A	35	LYS	C-N-CA	6.08	129.56	120.31	6	3
1	B	76	SER	N-CA-CB	-6.08	101.60	110.84	10	1
1	A	55	THR	CA-CB-OG1	6.08	118.72	109.60	10	2
1	B	9	GLN	OE1-CD-NE2	-6.08	116.52	122.60	2	2
1	B	54	VAL	CB-CA-C	6.07	118.25	111.45	8	1
1	B	63	ARG	NE-CZ-NH1	6.07	127.57	121.50	13	2
1	A	39	VAL	O-C-N	-6.07	115.97	121.91	8	1
1	A	44	VAL	O-C-N	-6.07	114.16	122.59	13	1
1	A	21	THR	N-CA-CB	-6.06	100.96	110.30	11	1
1	A	16	ASP	CA-C-O	-6.06	111.79	119.31	4	2
1	B	74	PRO	N-CA-CB	6.06	109.74	103.38	7	1
1	B	72	LYS	CA-C-N	6.05	131.23	120.70	4	1
1	B	72	LYS	C-N-CA	6.05	131.23	120.70	4	1
1	A	44	VAL	CA-CB-CG1	6.05	120.69	110.40	6	1
1	B	73	ILE	O-C-N	-6.04	117.26	121.55	3	1
1	A	1	MET	N-CA-CB	-6.04	100.56	110.52	4	1
1	A	51	LYS	CB-CA-C	6.04	121.30	109.35	9	2
1	A	48	GLY	CA-C-O	6.03	124.81	119.56	1	3
1	B	32	ASP	CA-CB-CG	-6.03	106.57	112.60	1	4
1	B	72	LYS	CB-CA-C	6.03	121.12	111.24	1	1
1	B	39	VAL	N-CA-CB	6.02	117.18	110.62	1	1
1	B	20	LYS	CA-C-O	-6.02	113.46	120.20	6	1
1	B	55	THR	CA-CB-CG2	6.01	120.72	110.50	12	2
1	B	51	LYS	N-CA-C	6.01	119.00	109.50	1	1
1	B	10	ILE	CA-C-O	-6.01	114.80	121.05	6	2
1	B	93	ASN	OD1-CG-ND2	-6.00	116.60	122.60	10	3
1	B	18	LEU	CA-C-N	6.00	130.75	122.77	3	2
1	B	18	LEU	C-N-CA	6.00	130.75	122.77	3	2
1	B	73	ILE	CA-C-O	5.99	122.47	119.12	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	24	GLU	CA-C-N	5.98	129.11	120.38	12	3
1	A	24	GLU	C-N-CA	5.98	129.11	120.38	12	3
1	A	27	THR	CA-CB-CG2	5.97	120.66	110.50	2	2
1	B	78	SER	O-C-N	-5.97	116.60	122.99	13	1
1	B	3	LYS	CA-C-O	5.96	126.70	119.31	1	1
1	A	38	LEU	N-CA-C	5.96	117.77	111.28	11	1
1	B	31	PHE	CA-C-N	5.95	129.35	120.31	2	4
1	B	31	PHE	C-N-CA	5.95	129.35	120.31	2	4
1	A	12	GLU	CA-C-O	5.94	126.22	119.27	5	1
1	B	69	GLU	N-CA-C	5.94	119.94	109.96	14	1
1	B	26	ILE	CB-CA-C	5.94	119.48	111.88	5	1
1	B	35	LYS	CB-CA-C	5.94	120.10	110.96	11	1
1	B	28	ASN	CA-C-N	5.93	129.32	120.31	14	4
1	B	28	ASN	C-N-CA	5.93	129.32	120.31	14	4
1	B	67	THR	CA-CB-CG2	5.93	120.58	110.50	12	1
1	A	77	LYS	CA-CB-CG	5.93	125.96	114.10	6	1
1	A	22	HIS	ND1-CG-CD2	5.92	112.02	106.10	4	2
1	B	33	HIS	N-CA-C	5.92	117.82	111.36	2	1
1	A	10	ILE	CA-C-O	-5.92	113.51	119.20	10	2
1	B	26	ILE	N-CA-C	5.92	116.66	110.62	14	3
1	B	31	PHE	CA-CB-CG	5.92	119.72	113.80	5	2
1	B	33	HIS	ND1-CG-CD2	5.92	112.02	106.10	13	2
1	A	7	ALA	CA-C-N	5.91	128.20	120.28	2	3
1	A	7	ALA	C-N-CA	5.91	128.20	120.28	2	3
1	B	70	THR	CA-CB-CG2	5.91	120.55	110.50	15	1
1	A	23	ALA	N-CA-CB	5.90	118.92	110.06	7	1
1	A	23	ALA	N-CA-C	5.90	119.31	111.75	4	2
1	A	86	GLN	OE1-CD-NE2	-5.90	116.70	122.60	8	1
1	A	22	HIS	CG-ND1-CE1	-5.90	99.27	109.30	4	2
1	A	92	ASN	OD1-CG-ND2	-5.90	116.70	122.60	15	2
1	B	64	ASN	CA-C-O	-5.89	113.91	119.80	7	2
1	B	76	SER	CA-C-N	5.89	130.84	122.72	3	1
1	B	76	SER	C-N-CA	5.89	130.84	122.72	3	1
1	A	37	ALA	CA-C-N	5.88	128.64	120.29	6	2
1	A	37	ALA	C-N-CA	5.88	128.64	120.29	6	2
1	B	21	THR	CA-CB-CG2	5.88	120.50	110.50	14	1
1	A	34	ILE	N-CA-CB	-5.88	103.99	110.51	1	1
1	A	34	ILE	CB-CA-C	5.87	119.39	111.88	1	1
1	B	61	ASP	CB-CA-C	5.87	121.64	109.38	7	1
1	B	73	ILE	N-CA-CB	-5.87	103.00	111.21	10	2
1	A	81	PHE	N-CA-C	-5.86	100.15	109.76	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	10	ILE	CA-CB-CG1	5.86	120.36	110.40	15	3
1	B	51	LYS	CA-C-O	-5.85	113.58	120.60	14	2
1	B	45	SER	O-C-N	-5.85	116.66	123.27	7	2
1	B	71	ILE	CA-C-O	-5.84	113.83	120.67	7	1
1	A	39	VAL	CA-CB-CG1	5.84	120.33	110.40	5	3
1	A	33	HIS	CG-CD2-NE2	-5.84	101.36	107.20	8	1
1	B	63	ARG	CA-C-N	5.84	128.78	120.49	4	2
1	B	63	ARG	C-N-CA	5.84	128.78	120.49	4	2
1	B	78	SER	CA-CB-OG	5.84	122.77	111.10	6	1
1	A	37	ALA	N-CA-C	-5.84	106.29	113.41	15	1
1	A	90	ASP	N-CA-CB	-5.82	101.97	110.47	7	1
1	B	89	THR	CA-CB-OG1	5.82	118.33	109.60	9	1
1	A	43	GLU	N-CA-CB	-5.82	100.94	110.42	1	1
1	A	0	HIS	N-CA-CB	-5.81	101.45	110.29	7	1
1	A	83	ALA	O-C-N	-5.79	116.02	122.86	1	1
1	A	1	MET	O-C-N	5.79	130.34	123.33	15	1
1	A	45	SER	CA-C-O	5.78	126.84	120.71	8	1
1	B	29	PHE	CD1-CG-CD2	5.78	127.27	118.60	5	1
1	A	42	LYS	CA-C-N	5.77	130.90	122.41	12	2
1	A	42	LYS	C-N-CA	5.77	130.90	122.41	12	2
1	A	52	PHE	CA-C-N	5.77	133.67	122.07	14	1
1	A	52	PHE	C-N-CA	5.77	133.67	122.07	14	1
1	B	64	ASN	OD1-CG-ND2	-5.76	116.84	122.60	2	1
1	B	35	LYS	N-CA-CB	-5.76	101.36	110.28	8	1
1	A	53	ALA	O-C-N	-5.75	117.77	123.46	4	2
1	B	61	ASP	CA-C-N	5.75	132.67	121.41	13	2
1	B	61	ASP	C-N-CA	5.75	132.67	121.41	13	2
1	B	82	LYS	CA-C-N	5.75	128.87	120.71	1	3
1	B	82	LYS	C-N-CA	5.75	128.87	120.71	1	3
1	B	22	HIS	ND1-CG-CD2	5.74	111.84	106.10	6	2
1	A	22	HIS	O-C-N	5.74	128.69	122.15	9	1
1	B	90	ASP	CA-CB-CG	5.74	118.34	112.60	1	1
1	B	33	HIS	CA-C-O	-5.74	114.80	120.82	5	3
1	A	93	ASN	OD1-CG-ND2	-5.73	116.87	122.60	14	1
1	A	27	THR	CA-CB-OG1	-5.73	101.01	109.60	7	1
1	A	89	THR	CA-C-O	-5.72	114.35	120.42	13	1
1	B	20	LYS	CG-CD-CE	5.72	124.45	111.30	2	1
1	B	25	GLU	O-C-N	5.71	129.08	122.17	11	1
1	A	30	VAL	CB-CA-C	-5.71	104.57	112.04	2	1
1	B	4	LYS	N-CA-C	5.70	118.44	111.82	1	1
1	B	10	ILE	CB-CA-C	5.70	119.51	112.04	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	89	THR	N-CA-CB	-5.70	100.63	110.32	15	1
1	A	79	ALA	CA-C-O	-5.70	113.84	120.62	2	2
1	A	40	ALA	CA-C-N	5.69	132.56	121.41	11	1
1	A	40	ALA	C-N-CA	5.69	132.56	121.41	11	1
1	B	28	ASN	CB-CG-ND2	5.68	124.93	116.40	14	1
1	A	21	THR	O-C-N	-5.68	114.68	122.46	15	1
1	B	1	MET	CB-CA-C	5.68	120.60	109.35	15	1
1	A	0	HIS	CE1-NE2-CD2	-5.68	103.32	109.00	13	3
1	A	26	ILE	CA-CB-CG2	5.68	120.15	110.50	10	4
1	B	60	ARG	NE-CZ-NH2	-5.67	114.09	119.20	11	1
1	B	2	SER	CA-C-O	5.67	128.58	121.66	5	1
1	A	80	LYS	O-C-N	-5.67	116.69	123.27	14	1
1	B	78	SER	CA-C-O	-5.66	114.64	121.32	1	1
1	B	70	THR	OG1-CB-CG2	-5.66	97.97	109.30	10	1
1	B	71	ILE	O-C-N	-5.66	116.26	122.83	2	1
1	A	90	ASP	CA-C-N	5.66	130.30	120.68	3	2
1	A	90	ASP	C-N-CA	5.66	130.30	120.68	3	2
1	B	75	ALA	N-CA-CB	-5.66	101.41	110.46	12	1
1	A	87	LEU	CB-CA-C	5.66	120.12	111.02	10	1
1	B	75	ALA	CA-C-O	-5.65	114.31	120.81	13	1
1	A	13	LYS	CA-C-N	5.64	132.75	121.81	6	1
1	A	13	LYS	C-N-CA	5.64	132.75	121.81	6	1
1	B	13	LYS	N-CA-CB	-5.64	101.87	110.33	6	1
1	B	34	ILE	CB-CA-C	5.62	119.08	111.88	5	1
1	B	70	THR	CA-C-O	-5.62	114.97	121.15	5	1
1	A	36	LYS	N-CA-C	5.62	118.17	111.71	8	1
1	B	65	PRO	CA-C-O	5.62	126.87	119.00	1	1
1	B	39	VAL	O-C-N	5.62	127.62	121.83	3	1
1	B	77	LYS	CA-C-N	5.61	131.41	122.10	15	2
1	B	77	LYS	C-N-CA	5.61	131.41	122.10	15	2
1	A	3	LYS	CB-CG-CD	5.61	124.20	111.30	7	1
1	B	37	ALA	O-C-N	-5.61	115.66	122.22	4	2
1	A	19	SER	CA-C-O	-5.61	114.90	121.46	7	1
1	A	25	GLU	CA-C-O	-5.61	114.90	121.07	10	1
1	B	16	ASP	N-CA-C	-5.60	106.61	113.50	6	1
1	B	63	ARG	O-C-N	-5.60	116.55	123.33	15	2
1	A	82	LYS	O-C-N	-5.60	116.68	123.29	9	1
1	B	59	ALA	N-CA-CB	-5.60	102.71	110.38	13	1
1	A	4	LYS	CA-C-N	5.59	128.23	120.29	1	1
1	A	4	LYS	C-N-CA	5.59	128.23	120.29	1	1
1	B	69	GLU	O-C-N	5.59	129.28	122.96	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	23	ALA	CA-C-N	5.59	128.04	120.44	15	1
1	B	23	ALA	C-N-CA	5.59	128.04	120.44	15	1
1	B	27	THR	CA-C-O	-5.58	114.04	120.24	12	1
1	A	50	GLY	CA-C-N	5.58	131.60	121.89	3	1
1	A	50	GLY	C-N-CA	5.58	131.60	121.89	3	1
1	A	16	ASP	N-CA-C	5.58	120.20	113.17	1	1
1	B	58	ALA	CA-C-O	-5.57	114.24	120.54	1	1
1	A	1	MET	CB-CA-C	5.57	120.01	109.37	12	1
1	B	60	ARG	CA-C-O	5.57	127.52	121.06	5	1
1	A	79	ALA	N-CA-C	5.57	118.54	108.69	8	1
1	B	20	LYS	CA-C-N	5.56	127.74	120.28	8	3
1	B	20	LYS	C-N-CA	5.56	127.74	120.28	8	3
1	A	77	LYS	O-C-N	-5.56	116.88	123.22	6	1
1	B	26	ILE	O-C-N	-5.56	116.11	121.83	6	1
1	A	36	LYS	O-C-N	5.55	128.53	122.20	14	1
1	B	35	LYS	CA-CB-CG	5.55	125.21	114.10	15	1
1	A	8	ALA	N-CA-CB	-5.55	101.08	110.41	14	1
1	A	43	GLU	O-C-N	-5.55	116.69	123.19	5	1
1	B	64	ASN	CB-CG-ND2	5.55	124.72	116.40	8	1
1	B	1	MET	CA-C-O	-5.55	113.94	120.60	8	1
1	A	26	ILE	N-CA-C	5.55	116.18	110.36	3	2
1	B	77	LYS	CB-CA-C	5.54	119.22	109.80	15	2
1	A	26	ILE	CB-CA-C	5.54	118.97	111.88	6	1
1	B	55	THR	CB-CA-C	5.53	119.83	109.71	15	3
1	B	63	ARG	CD-NE-CZ	5.53	132.14	124.40	6	3
1	A	18	LEU	CA-C-N	5.53	131.31	121.75	3	1
1	A	18	LEU	C-N-CA	5.53	131.31	121.75	3	1
1	A	15	THR	O-C-N	5.52	127.97	122.12	1	1
1	A	36	LYS	CA-C-O	-5.52	114.02	120.20	14	1
1	A	11	ALA	N-CA-C	5.52	119.11	112.38	13	2
1	B	36	LYS	CB-CA-C	5.52	121.40	110.42	10	1
1	B	74	PRO	CA-N-CD	-5.51	104.28	112.00	14	1
1	B	44	VAL	CA-C-O	5.51	126.47	120.57	6	1
1	A	15	THR	N-CA-C	5.50	117.28	111.28	1	2
1	B	50	GLY	CA-C-O	-5.50	114.58	121.02	12	1
1	A	10	ILE	CB-CA-C	5.49	119.24	112.04	15	1
1	A	20	LYS	CB-CA-C	5.49	121.34	110.42	2	1
1	A	78	SER	O-C-N	5.49	129.02	123.26	12	1
1	B	11	ALA	CA-C-N	5.48	128.65	120.31	7	1
1	B	11	ALA	C-N-CA	5.48	128.65	120.31	7	1
1	B	89	THR	O-C-N	-5.48	116.31	122.12	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	66	SER	CB-CA-C	-5.48	100.11	109.65	15	1
1	B	38	LEU	O-C-N	-5.48	115.53	122.27	10	1
1	A	5	GLU	CA-C-O	5.48	126.25	119.79	12	1
1	B	2	SER	N-CA-CB	-5.47	102.57	111.22	4	2
1	A	3	LYS	CA-C-N	5.47	129.36	120.60	14	1
1	A	3	LYS	C-N-CA	5.47	129.36	120.60	14	1
1	B	31	PHE	CB-CG-CD2	-5.47	111.41	120.70	8	1
1	A	86	GLN	O-C-N	5.46	128.61	122.22	8	1
1	A	37	ALA	CA-C-O	-5.46	114.63	120.42	12	1
1	B	21	THR	N-CA-CB	-5.46	102.13	110.26	6	1
1	A	29	PHE	CA-C-N	5.45	127.37	120.72	13	1
1	A	29	PHE	C-N-CA	5.45	127.37	120.72	13	1
1	B	68	GLY	N-CA-C	-5.44	107.28	114.95	7	2
1	A	42	LYS	N-CA-C	5.43	118.58	109.95	1	1
1	A	54	VAL	CB-CA-C	5.42	120.09	110.71	15	1
1	B	85	LYS	O-C-N	5.42	128.56	122.22	14	1
1	A	25	GLU	N-CA-C	-5.42	105.03	111.69	5	1
1	A	89	THR	CA-CB-OG1	5.42	117.72	109.60	12	2
1	A	86	GLN	N-CA-C	5.41	117.93	111.71	13	1
1	A	12	GLU	CA-C-N	5.41	129.83	120.58	15	1
1	A	12	GLU	C-N-CA	5.41	129.83	120.58	15	1
1	B	24	GLU	N-CA-C	-5.41	105.30	111.14	15	2
1	B	6	LEU	N-CA-C	5.40	117.92	111.71	10	1
1	B	92	ASN	CA-C-N	5.39	131.41	121.70	6	1
1	B	92	ASN	C-N-CA	5.39	131.41	121.70	6	1
1	A	38	LEU	CA-C-N	5.39	127.35	120.56	12	1
1	A	38	LEU	C-N-CA	5.39	127.35	120.56	12	1
1	B	49	PHE	N-CA-C	5.39	117.16	111.28	6	1
1	A	81	PHE	CA-C-O	-5.39	114.14	120.60	1	1
1	A	40	ALA	N-CA-C	5.38	117.90	111.71	9	1
1	A	5	GLU	CB-CG-CD	5.38	121.74	112.60	2	1
1	B	76	SER	CA-C-O	5.37	127.29	121.06	14	1
1	B	22	HIS	N-CA-C	-5.37	106.41	113.12	2	1
1	A	11	ALA	O-C-N	5.35	127.58	122.07	9	2
1	A	81	PHE	N-CA-CB	-5.35	101.89	110.46	11	1
1	A	22	HIS	N-CA-C	-5.35	105.36	111.14	3	1
1	A	53	ALA	CA-C-O	5.34	126.73	120.43	6	1
1	B	43	GLU	CA-C-N	5.34	129.19	121.18	10	1
1	B	43	GLU	C-N-CA	5.34	129.19	121.18	10	1
1	B	75	ALA	CB-CA-C	-5.33	101.56	110.29	9	1
1	B	82	LYS	O-C-N	-5.31	117.09	123.31	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	0	HIS	CB-CG-CD2	-5.31	124.29	131.20	10	1
1	A	1	MET	N-CA-C	-5.31	101.00	109.07	2	1
1	A	55	THR	CA-C-N	5.31	130.47	122.99	1	1
1	A	55	THR	C-N-CA	5.31	130.47	122.99	1	1
1	A	87	LEU	N-CA-CB	-5.31	102.79	110.70	3	1
1	B	28	ASN	O-C-N	5.31	127.82	122.09	13	1
1	B	79	ALA	CA-C-N	5.30	129.94	122.09	6	2
1	B	79	ALA	C-N-CA	5.30	129.94	122.09	6	2
1	A	21	THR	N-CA-C	5.30	117.14	111.36	12	1
1	A	2	SER	CA-C-N	5.29	127.32	120.44	14	4
1	A	2	SER	C-N-CA	5.29	127.32	120.44	14	4
1	A	54	VAL	CA-CB-CG1	5.29	119.39	110.40	1	1
1	B	91	LEU	N-CA-C	-5.29	105.43	111.14	1	1
1	B	75	ALA	N-CA-C	-5.28	101.83	109.59	3	1
1	A	46	ILE	CA-CB-CG2	5.28	119.48	110.50	11	1
1	A	83	ALA	CB-CA-C	-5.28	100.60	109.83	5	1
1	A	19	SER	N-CA-C	-5.27	101.28	109.72	1	1
1	B	20	LYS	CA-CB-CG	5.27	124.65	114.10	2	2
1	A	15	THR	CA-C-O	5.27	126.32	120.63	8	1
1	A	25	GLU	N-CA-CB	-5.27	102.18	110.30	13	1
1	B	19	SER	O-C-N	5.26	129.79	123.16	12	1
1	B	22	HIS	CG-CD2-NE2	5.26	112.46	107.20	12	1
1	B	83	ALA	CB-CA-C	-5.26	99.78	109.46	13	1
1	B	14	PHE	CZ-CE2-CD2	5.25	129.46	120.00	2	1
1	A	49	PHE	N-CA-CB	-5.25	102.39	110.16	11	1
1	A	45	SER	CA-C-N	5.25	127.95	122.96	1	1
1	A	45	SER	C-N-CA	5.25	127.95	122.96	1	1
1	A	90	ASP	CA-C-O	5.25	124.67	118.90	4	1
1	A	15	THR	OG1-CB-CG2	-5.25	98.81	109.30	8	1
1	B	39	VAL	CA-CB-CG1	5.25	119.32	110.40	4	2
1	A	0	HIS	CB-CG-CD2	-5.23	124.40	131.20	4	1
1	B	28	ASN	OD1-CG-ND2	-5.23	117.37	122.60	13	1
1	A	22	HIS	N-CA-CB	-5.23	102.25	110.30	15	1
1	A	26	ILE	O-C-N	-5.22	116.72	121.94	6	1
1	B	46	ILE	N-CA-C	-5.22	99.73	107.51	1	2
1	B	-1	GLY	CA-C-N	5.22	130.97	121.89	1	1
1	B	-1	GLY	C-N-CA	5.22	130.97	121.89	1	1
1	B	23	ALA	CA-C-O	-5.22	114.99	120.63	4	2
1	B	76	SER	O-C-N	-5.22	117.22	123.27	14	1
1	B	26	ILE	N-CA-CB	-5.21	104.45	110.55	13	1
1	A	4	LYS	CA-C-O	-5.21	114.22	120.10	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	45	SER	CA-CB-OG	-5.21	100.68	111.10	14	1
1	B	91	LEU	CA-C-O	-5.21	115.35	120.82	10	1
1	A	48	GLY	O-C-N	-5.20	118.55	122.71	3	1
1	A	53	ALA	N-CA-CB	-5.20	103.19	111.62	11	1
1	B	82	LYS	CA-C-O	-5.20	114.73	120.30	1	1
1	A	18	LEU	CA-C-O	5.20	125.95	120.33	8	1
1	B	30	VAL	CA-CB-CG1	5.20	119.24	110.40	13	1
1	A	88	LYS	CB-CA-C	5.20	120.77	110.42	1	1
1	A	16	ASP	N-CA-CB	-5.19	101.94	110.40	4	1
1	A	34	ILE	CA-CB-CG2	5.18	119.31	110.50	11	1
1	B	83	ALA	CA-C-O	-5.18	116.08	121.99	12	1
1	A	28	ASN	CB-CG-ND2	5.18	124.17	116.40	1	1
1	B	54	VAL	CA-CB-CG1	5.18	119.20	110.40	15	1
1	B	68	GLY	CA-C-O	5.17	124.93	119.03	4	1
1	B	46	ILE	CA-C-N	5.17	131.42	121.54	5	1
1	B	46	ILE	C-N-CA	5.17	131.42	121.54	5	1
1	B	49	PHE	N-CA-CB	-5.17	102.57	110.33	5	1
1	B	10	ILE	CA-C-N	5.17	127.64	120.29	7	1
1	B	10	ILE	C-N-CA	5.17	127.64	120.29	7	1
1	A	79	ALA	O-C-N	-5.16	116.92	123.01	10	1
1	B	3	LYS	O-C-N	-5.15	115.63	122.33	8	1
1	A	86	GLN	CA-C-N	5.15	130.30	122.37	11	2
1	A	86	GLN	C-N-CA	5.15	130.30	122.37	11	2
1	B	24	GLU	CA-C-O	-5.15	113.71	119.79	2	1
1	B	13	LYS	O-C-N	-5.15	115.43	122.33	10	1
1	B	71	ILE	CA-C-N	5.15	131.37	121.54	15	2
1	B	71	ILE	C-N-CA	5.15	131.37	121.54	15	2
1	B	86	GLN	N-CA-C	5.14	121.75	110.80	13	1
1	A	23	ALA	O-C-N	-5.14	116.67	122.12	14	1
1	B	92	ASN	O-C-N	-5.14	117.19	123.10	11	1
1	B	38	LEU	N-CA-CB	-5.13	102.32	110.28	9	1
1	B	79	ALA	O-C-N	-5.13	116.81	122.86	9	1
1	B	4	LYS	CA-C-O	5.13	125.90	120.10	14	1
1	A	45	SER	CA-CB-OG	5.13	121.36	111.10	7	1
1	B	85	LYS	CG-CD-CE	5.13	123.09	111.30	1	1
1	B	27	THR	N-CA-CB	-5.12	102.35	110.28	8	1
1	B	15	THR	CA-C-O	-5.11	113.31	119.49	1	1
1	A	82	LYS	CA-C-N	5.10	129.86	121.39	12	1
1	A	82	LYS	C-N-CA	5.10	129.86	121.39	12	1
1	A	44	VAL	N-CA-C	5.10	114.63	106.88	13	1
1	A	45	SER	O-C-N	-5.09	116.74	123.21	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	12	GLU	CB-CG-CD	5.09	121.25	112.60	1	1
1	B	53	ALA	CA-C-N	5.09	128.18	120.75	15	1
1	B	53	ALA	C-N-CA	5.09	128.18	120.75	15	1
1	B	0	HIS	ND1-CG-CD2	5.09	111.19	106.10	6	1
1	B	9	GLN	CA-C-O	5.09	126.14	120.80	7	1
1	B	73	ILE	N-CA-C	5.08	112.19	107.56	3	1
1	B	43	GLU	CA-C-O	5.08	126.02	120.58	13	1
1	A	51	LYS	CA-C-N	5.08	131.28	122.64	6	1
1	A	51	LYS	C-N-CA	5.08	131.28	122.64	6	1
1	A	20	LYS	N-CA-C	5.07	117.54	111.71	14	1
1	B	82	LYS	N-CA-CB	-5.06	102.31	110.81	11	1
1	B	6	LEU	CB-CA-C	-5.06	102.24	110.85	14	1
1	A	46	ILE	CA-C-N	5.06	131.21	121.54	9	1
1	A	46	ILE	C-N-CA	5.06	131.21	121.54	9	1
1	A	92	ASN	N-CA-CB	-5.05	102.55	109.97	11	1
1	B	34	ILE	N-CA-C	-5.05	106.23	111.58	1	1
1	A	89	THR	CA-CB-CG2	5.05	119.08	110.50	2	1
1	B	22	HIS	CA-CB-CG	5.05	118.85	113.80	11	1
1	B	92	ASN	CB-CG-ND2	5.05	123.97	116.40	11	1
1	A	77	LYS	CB-CA-C	5.05	117.99	110.62	13	1
1	A	39	VAL	CA-C-O	-5.04	115.45	121.05	13	1
1	A	32	ASP	CA-C-O	5.04	125.76	120.42	9	1
1	A	89	THR	N-CA-CB	-5.04	101.75	110.32	3	1
1	A	12	GLU	N-CA-C	-5.04	105.70	111.14	11	1
1	B	60	ARG	NE-CZ-NH1	5.04	126.54	121.50	11	1
1	B	60	ARG	N-CA-C	-5.03	100.84	109.24	11	1
1	A	2	SER	CB-CA-C	5.03	118.10	109.80	5	1
1	A	4	LYS	N-CA-C	-5.03	105.99	111.82	7	1
1	A	42	LYS	CA-C-O	5.03	126.70	120.92	13	1
1	A	77	LYS	N-CA-C	-5.01	101.54	109.76	3	1
1	B	53	ALA	N-CA-C	-5.01	101.46	109.23	12	1
1	A	-1	GLY	CA-C-N	5.01	130.06	123.00	9	1
1	A	-1	GLY	C-N-CA	5.01	130.06	123.00	9	1
1	A	34	ILE	CA-C-O	-5.01	115.54	120.85	10	1
1	A	17	VAL	CA-C-N	5.00	131.72	122.92	3	1
1	A	17	VAL	C-N-CA	5.00	131.72	122.92	3	1
1	B	9	GLN	CG-CD-NE2	5.00	123.90	116.40	4	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	14	PHE	Sidechain	3
1	B	63	ARG	Sidechain	2
1	A	81	PHE	Sidechain	2
1	B	81	PHE	Sidechain	1
1	B	67	THR	Mainchain	1
1	A	0	HIS	Peptide	1
1	A	33	HIS	Sidechain	1
1	B	22	HIS	Sidechain	1
1	B	69	GLU	Sidechain	1
1	B	75	ALA	Peptide	1
1	B	60	ARG	Sidechain	1
1	B	10	ILE	Mainchain	1
1	A	49	PHE	Sidechain	1
1	A	12	GLU	Sidechain	1
1	B	31	PHE	Sidechain	1
1	B	38	LEU	Mainchain	1

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	B	704	731	731	0±0
1	A	569	595	595	0±0
All	All	19095	19890	19890	7

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 0.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:B:34:ILE:HG23	1:B:44:VAL:HG11	0.56	1.78	4	1
1:B:88:LYS:HG3	1:B:89:THR:H	0.55	1.61	1	1
1:A:33:HIS:CE1	1:B:1:MET:CE	0.47	2.97	13	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:36:LYS:NZ	0.47	2.44	7	1
1:A:31:PHE:CD1	1:A:31:PHE:N	0.43	2.87	5	1
1:A:20:LYS:O	1:A:23:ALA:HB3	0.42	2.14	11	1
1:B:43:GLU:OE2	1:B:51:LYS:NZ	0.41	2.47	3	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	72/95 (76%)	66±2 (92±3%)	5±2 (7±3%)	0±1 (1±1%)	23	72
1	B	91/95 (96%)	82±3 (90±3%)	8±2 (9±2%)	1±1 (1±1%)	20	70
All	All	2445/2850 (86%)	2229 (91%)	200 (8%)	16 (1%)	20	70

All 12 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	47	ALA	4
1	B	85	LYS	2
1	A	20	LYS	1
1	B	83	ALA	1
1	A	29	PHE	1
1	B	75	ALA	1
1	A	85	LYS	1
1	B	9	GLN	1
1	B	35	LYS	1
1	B	34	ILE	1
1	B	47	ALA	1
1	B	20	LYS	1

6.3.2 Protein sidechains

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	59/75 (79%)	57±1 (97±1%)	2±1 (3±1%)	40	87
1	B	73/75 (97%)	71±1 (97±2%)	2±1 (3±2%)	35	84
All	All	1980/2250 (88%)	1921 (97%)	59 (3%)	37	85

All 34 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	B	91	LEU	5
1	B	61	ASP	5
1	B	89	THR	4
1	A	17	VAL	3
1	A	91	LEU	2
1	B	16	ASP	2
1	B	87	LEU	2
1	A	44	VAL	2
1	B	17	VAL	2
1	B	93	ASN	2
1	A	29	PHE	2
1	B	29	PHE	2
1	B	90	ASP	2
1	A	89	THR	2
1	A	90	ASP	2
1	B	25	GLU	2
1	A	35	LYS	1
1	B	5	GLU	1
1	A	55	THR	1
1	B	24	GLU	1
1	B	77	LYS	1
1	A	39	VAL	1
1	B	39	VAL	1
1	A	9	GLN	1
1	A	24	GLU	1
1	B	88	LYS	1
1	A	30	VAL	1
1	A	15	THR	1
1	A	16	ASP	1
1	A	0	HIS	1
1	A	6	LEU	1
1	A	54	VAL	1
1	B	10	ILE	1
1	B	15	THR	1

6.3.3 RNA ⓘ

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 12% for the well-defined parts and 13% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *Spm_BMRB.tab*

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	320
Number of shifts mapped to atoms	320
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	78	-0.06 ± 0.27	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	41	0.53 ± 0.34	None needed (imprecise)
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	78	0.42 ± 0.40	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 12%, i.e. 261 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2232. 0 out of 20 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	226/843 (27%)	104/344 (30%)	61/334 (18%)	61/165 (37%)
Sidechain	35/1227 (3%)	0/797 (0%)	35/386 (9%)	0/44 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	0/162 (0%)	0/84 (0%)	0/72 (0%)	0/6 (0%)
Overall	261/2232 (12%)	104/1225 (8%)	96/792 (12%)	61/215 (28%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 13%, i.e. 320 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2536. 0 out of 20 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	279/956 (29%)	123/390 (32%)	78/380 (21%)	78/186 (42%)
Sidechain	41/1418 (3%)	0/918 (0%)	41/442 (9%)	0/58 (0%)
Aromatic	0/162 (0%)	0/84 (0%)	0/72 (0%)	0/6 (0%)
Overall	320/2536 (13%)	123/1392 (9%)	119/894 (13%)	78/250 (31%)

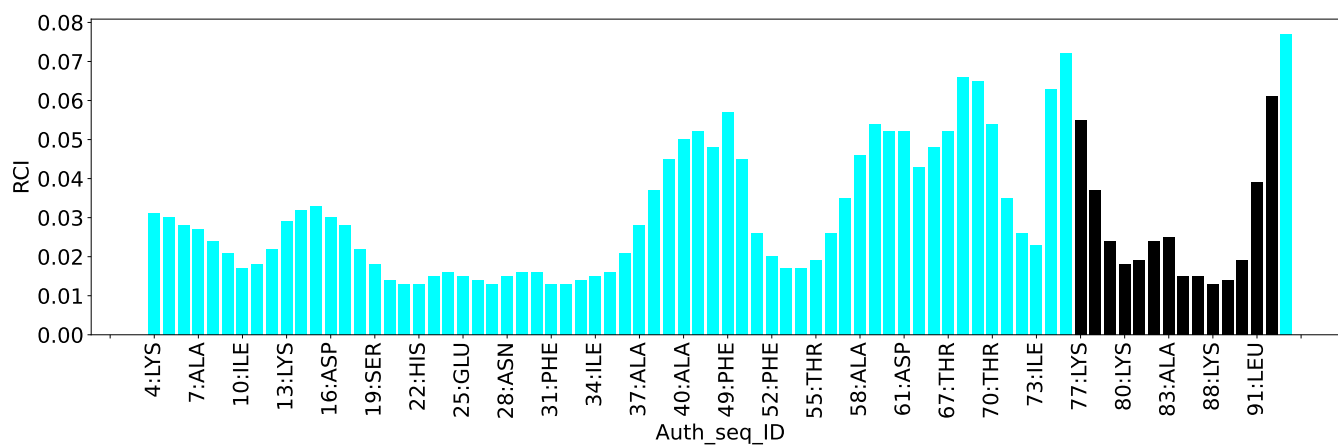
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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	255
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	0
Number of long range restraints per residue ¹	0

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

8.2 Residual restraint violations [i](#)

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

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

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation. 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)	55.2	10.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
10.0-20.0 (Medium)	35.7	19.97
>20.0 (Large)	65.0	172.82

9 Distance violation analysis ⓘ

No distance restraints data found

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

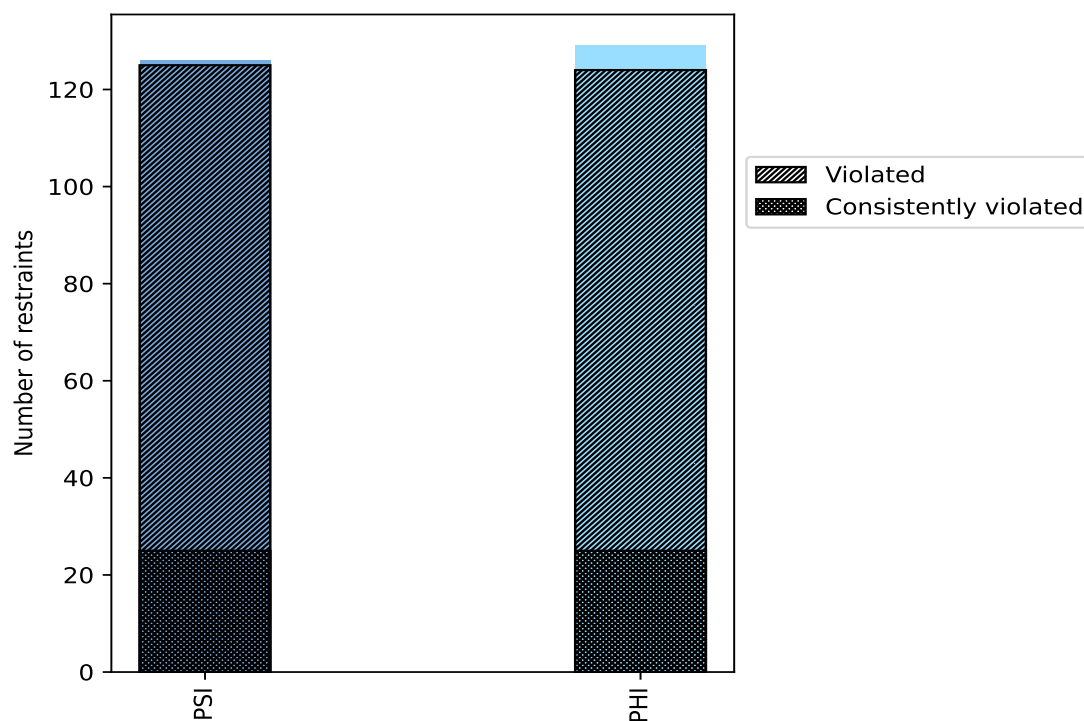
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PSI	126	49.4	125	99.2	49.0	25	19.8	9.8
PHI	129	50.6	124	96.1	48.6	25	19.4	9.8
Total	255	100.0	249	97.6	97.6	50	19.6	19.6

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

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



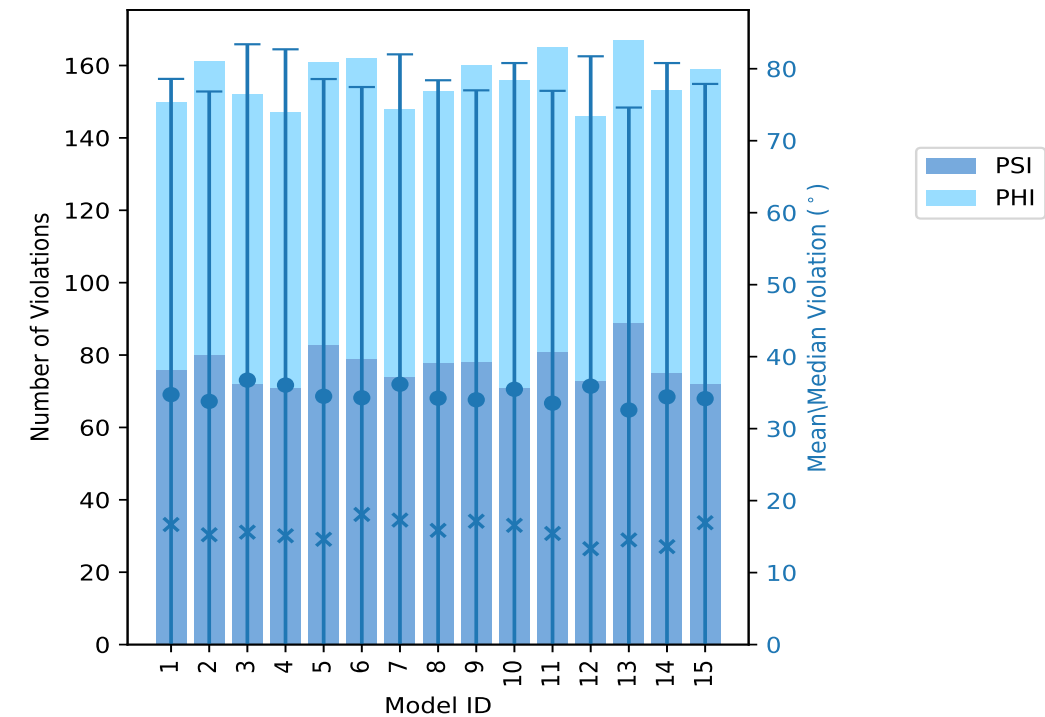
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model ⓘ

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	76	74	150	34.73	171.08	43.86	16.68
2	80	81	161	33.79	171.15	43.05	15.26
3	72	80	152	36.74	163.22	46.66	15.62
4	71	76	147	36.05	171.69	46.65	15.12
5	83	78	161	34.5	169.67	44.07	14.63
6	79	83	162	34.29	171.39	43.17	18.08
7	74	74	148	36.17	171.11	45.83	17.3
8	78	75	153	34.23	172.82	44.17	15.87
9	78	82	160	34.01	172.37	42.99	17.14
10	71	85	156	35.47	170.28	45.32	16.57
11	81	84	165	33.54	170.94	43.39	15.44
12	73	73	146	35.9	169.67	45.83	13.32
13	89	78	167	32.59	169.0	42.02	14.54
14	75	78	153	34.42	170.24	46.37	13.61
15	72	87	159	34.17	166.27	43.72	16.93

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model ⓘ



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

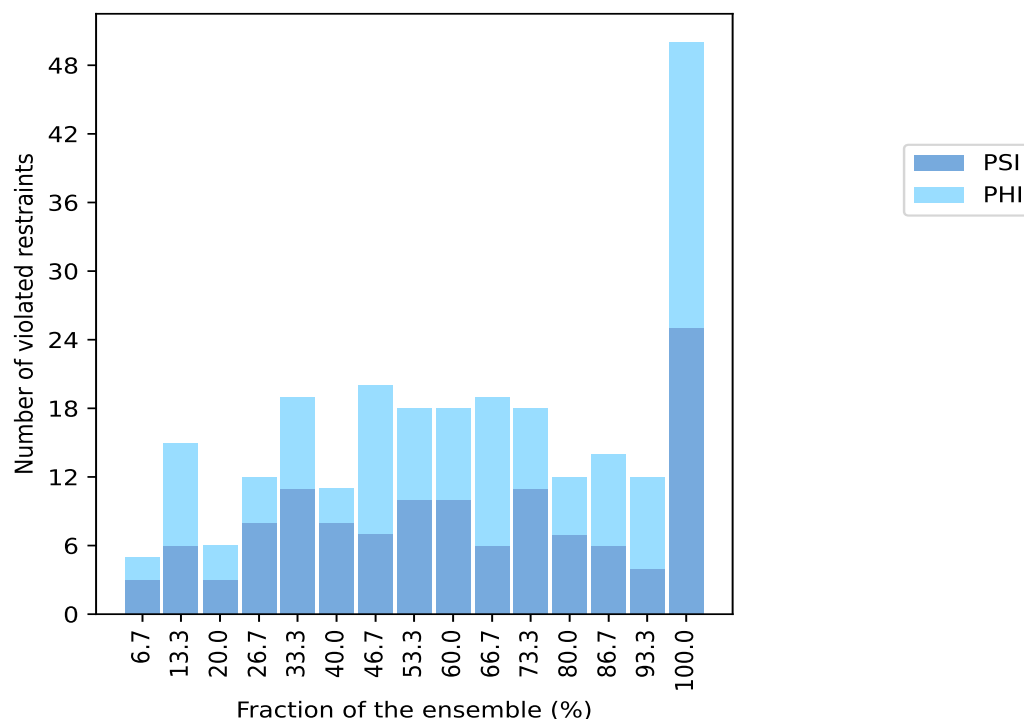
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
3	2	5	1	6.7
6	9	15	2	13.3
3	3	6	3	20.0
8	4	12	4	26.7
11	8	19	5	33.3
8	3	11	6	40.0
7	13	20	7	46.7
10	8	18	8	53.3
10	8	18	9	60.0
6	13	19	10	66.7
11	7	18	11	73.3
7	5	12	12	80.0
6	8	14	13	86.7
4	8	12	14	93.3
25	25	50	15	100.0

¹ Number of models with violations

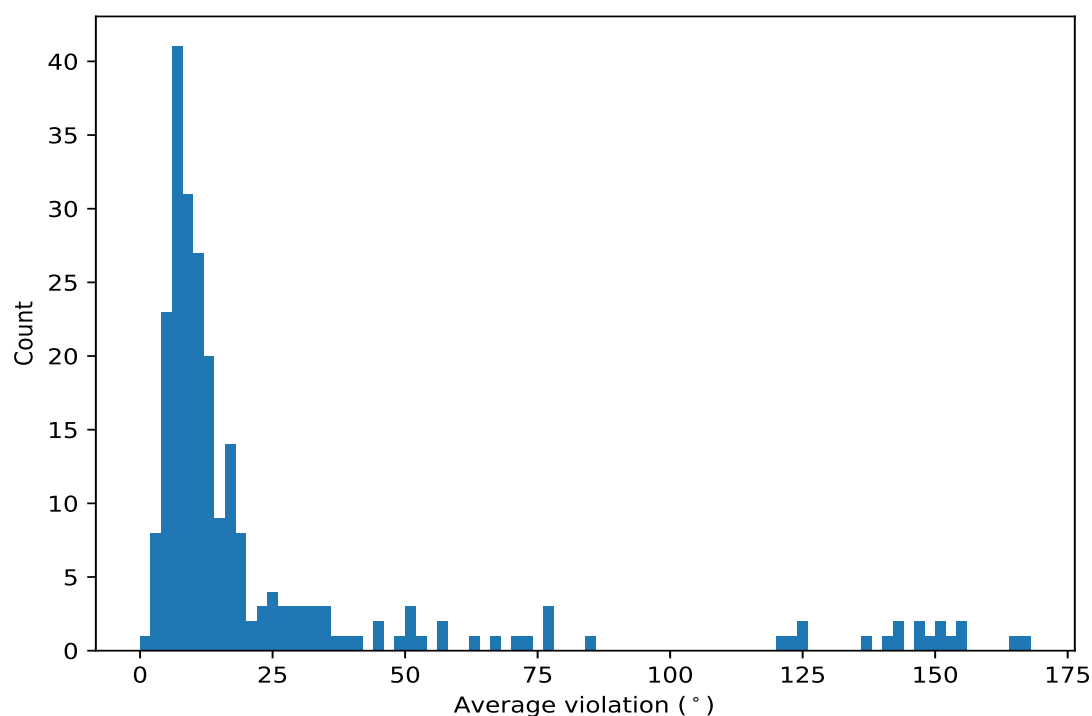
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	15	166.61	4.82	167.57
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	15	165.7	4.58	167.54
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	15	155.83	9.95	161.34
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	15	155.6	7.41	158.71
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	15	153.03	7.76	152.73
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	15	150.83	7.89	150.73
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	15	150.27	6.33	151.85
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	15	149.74	5.44	149.49
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	15	147.5	9.2	148.73
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	15	146.8	14.56	147.03
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	15	143.63	12.3	147.16
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	15	143.17	27.75	156.09
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	15	136.73	12.13	137.06
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	15	125.81	9.97	123.69
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	15	125.65	12.95	126.13
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	15	123.32	10.51	125.68
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	15	120.85	14.01	122.32
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	15	85.46	13.72	86.83
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	15	76.42	10.98	76.89
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	15	76.19	0.0	76.19
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	15	72.49	12.98	74.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	15	70.09	6.37	69.88
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	15	67.49	17.02	66.27
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	15	62.05	13.2	61.19
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	15	56.51	18.46	59.83
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	15	52.18	8.92	54.65
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	15	50.58	12.42	50.53
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	15	50.4	13.76	51.38
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	15	50.24	16.03	50.93
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	15	49.84	15.56	56.13
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	15	45.51	12.56	42.19
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	15	45.04	21.82	45.69
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	15	40.21	15.01	44.78
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	15	39.45	16.71	41.22
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	15	37.72	7.3	38.49
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	15	35.15	11.23	39.67
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	15	34.35	7.48	35.58
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	15	32.95	23.09	23.84
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	15	32.29	13.52	30.35
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	15	32.02	9.91	31.37
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	15	31.38	10.67	29.41
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	15	30.38	13.39	26.25
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	15	29.09	11.78	29.0
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	15	28.76	8.52	26.74
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	15	27.54	11.74	29.56
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	15	20.13	6.85	20.18
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	15	18.94	7.13	18.94
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	15	14.76	9.68	11.68
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	15	13.96	8.32	12.55
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	15	12.33	5.27	11.18
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	14	141.71	28.13	154.45
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	14	77.02	16.97	78.34
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	14	56.93	21.12	60.72
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	14	28.85	13.43	28.3
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	14	27.61	11.66	32.0
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	14	25.82	10.85	28.22
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	14	25.29	12.47	22.18
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	14	19.19	14.13	13.65
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	14	15.57	8.29	14.76
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	14	11.75	7.82	12.21
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	14	11.61	8.12	8.54
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	14	8.1	4.41	6.04
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	13	34.22	18.96	33.5
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	13	30.12	10.7	32.31
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	13	27.88	17.05	28.04
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	13	23.55	17.5	20.6
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	13	23.46	11.73	19.31
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	13	23.42	12.1	19.8
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	13	19.09	12.87	15.76
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	13	18.88	12.75	17.84
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	13	16.82	12.89	12.9
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	13	16.49	12.9	17.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	13	16.25	8.67	18.05
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	13	16.13	8.78	15.55
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	13	12.85	8.36	14.1
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	13	8.83	6.37	8.85
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	12	25.02	12.65	26.19
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	12	18.51	12.31	14.62
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	12	17.71	10.54	16.06
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	12	15.12	10.12	14.7
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	12	11.49	6.57	9.07
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	12	10.94	6.87	10.25
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	12	9.18	5.2	6.76
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	12	9.13	8.84	4.42
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	12	8.19	4.33	7.55
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	12	7.92	5.94	6.13
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	12	7.46	4.37	7.51
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	12	5.46	4.87	3.78
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	11	21.35	12.23	18.29
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	11	18.62	22.4	11.27
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	11	17.18	10.4	14.94
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	11	17.15	7.69	18.59
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	11	16.92	10.92	18.08
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	11	14.33	8.95	15.03
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	11	14.2	6.77	12.47
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	11	13.87	9.28	12.14
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	11	12.83	4.95	14.03
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	11	12.64	7.26	9.28
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	11	12.59	7.25	11.86
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	11	11.64	5.02	13.5
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	11	10.97	5.68	10.68
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	11	8.22	6.77	4.2
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	11	8.0	5.62	7.12
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	11	7.92	4.19	8.53
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	11	7.26	5.15	4.68
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	11	6.86	5.01	4.23
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	10	25.3	8.79	23.04
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	10	15.51	8.89	12.81
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	10	14.27	11.72	10.14
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	10	14.2	4.66	14.68
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	10	14.08	10.59	12.99
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	10	13.36	6.49	11.38
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	10	13.16	6.47	12.96
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	10	12.96	7.77	11.75
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	10	11.95	9.12	10.72
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	10	11.72	3.89	11.54
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	10	11.26	4.14	11.16
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	10	10.08	5.26	8.98
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	10	9.9	6.45	10.78
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	10	9.6	5.34	9.03
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	10	9.19	7.32	5.4
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	10	7.8	5.31	6.6
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	10	7.66	4.12	7.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	10	6.28	2.6	5.88
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	10	6.2	2.69	5.22
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	9	17.59	8.76	18.12
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	9	16.81	9.68	13.01
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	9	16.58	11.26	14.13
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	9	12.12	6.69	14.13
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	9	11.8	6.4	10.1
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	9	11.58	5.46	10.72
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	9	11.32	4.78	10.92
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	9	10.97	6.63	9.84
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	9	10.1	4.81	8.92
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	9	9.49	4.54	10.11
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	9	9.08	4.75	9.03
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	9	7.48	4.1	6.7
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	9	7.22	5.82	5.78
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	9	7.13	4.52	6.36
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	9	6.51	5.25	3.28
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	9	6.12	3.22	7.36
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	9	5.49	4.36	5.27
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	9	5.0	3.55	3.92
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	8	13.42	8.24	10.66
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	8	12.55	8.86	9.8
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	8	12.15	7.72	10.36
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	8	12.14	6.55	10.3
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	8	10.45	6.36	9.22
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	8	10.37	7.73	7.58
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	8	10.34	3.87	8.32
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	8	10.3	5.74	9.9
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	8	10.12	8.48	6.7
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	8	8.33	4.32	8.01
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	8	8.23	8.81	4.91
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	8	7.74	6.93	4.35
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	8	7.65	2.96	8.03
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	8	7.64	5.65	6.19
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	8	7.6	4.99	5.74
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	8	7.58	4.06	7.44
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	8	7.53	5.72	4.68
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	8	4.17	3.04	3.46
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	7	16.15	10.37	12.31
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	7	13.3	8.09	11.22
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	7	13.14	4.02	12.31
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	7	11.22	7.32	11.99
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	7	10.46	7.66	6.65
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	7	9.87	7.7	7.75
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	7	9.12	7.77	4.96
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	7	8.58	5.5	8.65
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	7	8.34	6.29	6.94
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	7	8.22	4.57	6.48
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	7	7.91	3.13	8.2
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	7	7.84	7.08	5.68
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	7	7.12	2.46	7.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	7	6.99	7.41	2.16
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	7	6.93	3.72	6.32
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	7	6.74	3.9	7.28
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	7	5.93	3.46	6.2
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	7	5.88	7.93	2.72
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	7	5.6	4.53	4.5
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	7	4.36	2.76	3.66
(1,204)	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	6	16.83	6.01	14.8
(1,217)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	6	12.4	9.52	9.29
(1,11)	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	6	12.1	3.75	13.37
(1,214)	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	6	10.22	7.79	7.9
(1,114)	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	6	8.64	7.1	5.32
(1,79)	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	1:28:A:ASN:N	6	8.24	3.27	8.94
(1,15)	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	6	7.72	2.92	6.86
(1,211)	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	6	7.58	5.68	5.7
(1,36)	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	6	7.52	4.77	5.41
(1,67)	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	6	6.4	2.5	5.91
(1,112)	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	6	3.94	1.73	4.02
(1,207)	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	1:77:B:LYS:N	5	19.71	15.22	18.8
(1,146)	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	5	16.42	7.58	19.39
(1,225)	1:81:B:PHE:C	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	5	12.01	9.41	7.74
(1,159)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	5	10.3	6.0	9.62
(1,157)	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	5	9.72	7.71	7.46
(1,131)	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	5	9.6	5.45	6.93
(1,98)	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	5	8.97	5.49	11.74
(1,121)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	5	8.42	5.33	7.9
(1,108)	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	5	8.06	6.28	4.8
(1,158)	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	5	7.63	4.99	5.44
(1,71)	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	5	7.25	4.71	10.13
(1,247)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	5	6.84	2.98	7.18
(1,141)	1:51:A:LYS:C	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	5	5.83	2.26	6.8
(1,152)	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	5	5.38	4.82	3.02
(1,80)	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	5	5.09	2.93	5.11
(1,147)	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	5	4.86	4.42	4.24
(1,104)	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	5	4.41	2.68	6.24
(1,123)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	5	4.14	2.48	4.3
(1,209)	1:77:A:LYS:C	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	5	3.96	2.32	3.32
(1,39)	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	4	11.16	4.44	11.62
(1,13)	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	4	9.87	7.05	7.09
(1,53)	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	4	8.64	5.08	9.04
(1,59)	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	4	8.54	6.36	5.94
(1,148)	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	4	8.36	4.95	7.74
(1,77)	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	4	7.9	4.08	7.94
(1,168)	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	4	7.46	3.3	7.58
(1,183)	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	1:65:B:PRO:N	4	6.49	4.38	6.85
(1,151)	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	1:55:B:THR:N	4	6.04	1.82	5.74
(1,216)	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	4	5.42	2.99	5.74
(1,232)	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	1:86:B:GLN:N	4	5.25	2.85	4.37
(1,14)	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	4	3.25	2.37	2.27
(1,184)	1:64:A:ASN:N	1:64:A:ASN:CA	1:64:A:ASN:C	1:65:A:PRO:N	3	11.65	6.59	13.55
(1,8)	1:8:A:ALA:N	1:8:A:ALA:CA	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	3	9.88	1.72	10.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

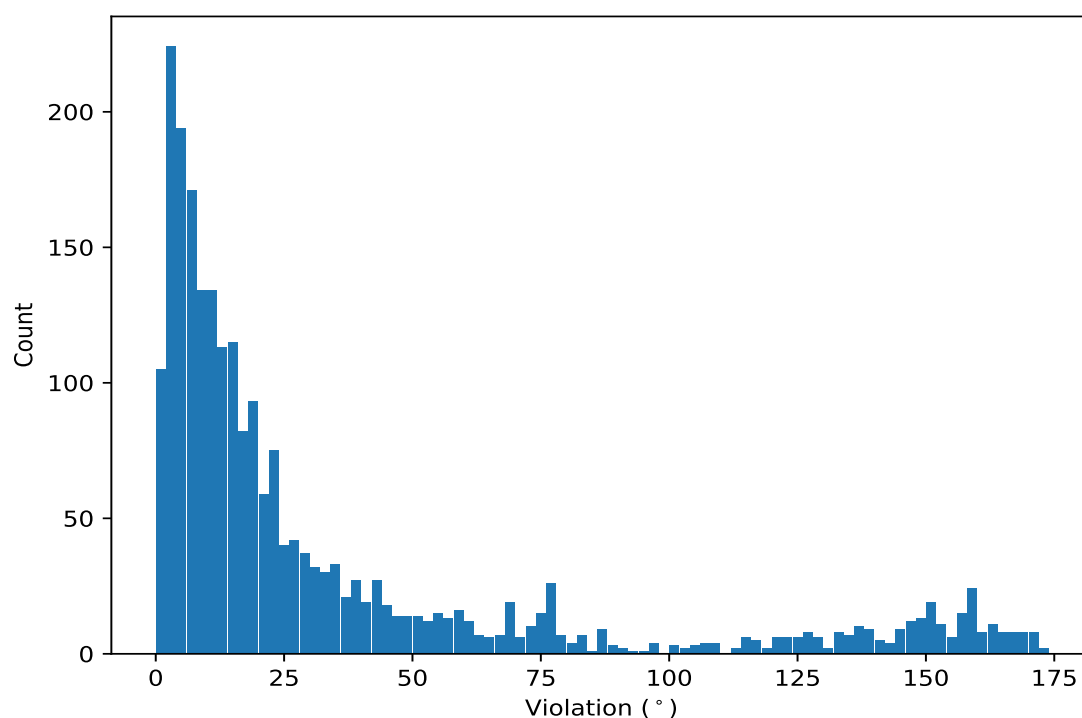
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,7)	1:8:B:ALA:N	1:8:B:ALA:CA	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	3	7.34	3.99	8.27
(1,198)	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	3	4.29	3.38	2.12
(1,145)	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	3	3.9	0.2	3.84
(1,113)	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	3	2.87	0.17	2.85
(1,215)	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	2	18.25	1.4	18.25
(1,40)	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	2	11.6	6.57	11.6
(1,197)	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	2	7.5	0.34	7.5
(1,89)	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	2	6.64	2.41	6.64
(1,84)	1:28:A:ASN:N	1:28:A:ASN:CA	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	2	6.33	2.45	6.33
(1,226)	1:81:A:PHE:C	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	2	5.44	2.2	5.44
(1,181)	1:63:B:ARG:C	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	2	4.77	0.6	4.77
(1,153)	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	2	4.42	1.92	4.42
(1,120)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	2	4.23	0.45	4.23
(1,167)	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	2	4.11	0.58	4.11
(1,137)	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	2	4.03	0.71	4.03
(1,182)	1:63:A:ARG:C	1:64:A:ASN:N	1:64:A:ASN:CA	1:64:A:ASN:C	2	3.53	1.23	3.53
(1,54)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	2	3.26	0.68	3.26
(1,119)	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	2	3.26	0.48	3.26
(1,81)	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	1:28:B:ASN:CA	1:28:B:ASN:C	2	1.82	0.18	1.82

¹ Number of violated models, ²Standard 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 (°)
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	8	172.82
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	9	172.37
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	4	171.69
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	6	171.39
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	2	171.15
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	7	171.11
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1	171.08
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	11	170.94
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	10	170.28
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	14	170.24
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	12	169.67
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	5	169.67
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	9	169.57
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	12	169.23
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	8	169.03
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	13	169.0
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	14	168.73
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	12	168.02
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	10	167.61
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	5	167.57
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1	167.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	2	167.49
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	11	167.07
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	9	166.32
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	15	166.27
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1	166.08
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	6	165.91
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	12	165.52
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	11	165.26
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	9	165.06
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	10	165.06
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	6	165.01
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	4	164.92
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	15	164.67
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	13	163.36
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	3	163.22
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	2	163.19
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	3	163.15
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	3	162.92
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	5	162.89
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	3	162.89
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	15	162.47
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	14	162.3
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	7	162.22
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	4	162.22
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1	161.82
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	7	161.63
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	3	161.42
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	6	161.34
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	5	161.31
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	3	161.25
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	7	160.18
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	7	160.07
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	8	159.67
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	11	159.64
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	2	159.61
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	10	159.6
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	15	159.56
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	5	159.42
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	4	159.32
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	3	159.28
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	5	159.21
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	8	159.04
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	13	158.99
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	8	158.79
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	7	158.76
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	10	158.73
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	9	158.71
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	2	158.71
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	11	158.63
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	14	158.63
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	9	158.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	5	158.48
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	4	158.43
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	11	158.33
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	12	158.2
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	15	158.07
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	7	157.97
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	3	157.94
(1,134)	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	12	157.9
(1,133)	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	13	157.89
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	14	157.7
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	15	157.61
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	4	157.0
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	10	156.93
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	2	156.7
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	15	156.64
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	14	156.48
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	3	156.37
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	8	156.09
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	14	156.02
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	11	156.01
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	7	155.92
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	13	155.91
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	10	155.48
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	13	155.36
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1	155.33
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	14	154.65
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	7	153.95
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	14	153.79
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	9	153.78
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	3	153.57
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	11	153.44
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	15	153.06
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	4	152.78
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	10	152.73
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	10	152.7
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	8	152.69
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	11	152.08
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	4	151.97
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	13	151.95
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	14	151.94
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	12	151.86
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	5	151.85
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	7	151.76
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	12	151.7
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	11	151.38
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	8	151.35
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	13	151.3
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	14	151.29
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	5	150.97
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1	150.87
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	3	150.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	6	150.76
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	6	150.73
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	6	150.42
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	10	150.12
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	6	150.08
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	9	149.77
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	8	149.65
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	6	149.49
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	13	149.32
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	14	149.25
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	2	148.97
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	2	148.92
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	10	148.77
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	10	148.73
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	12	148.68
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	15	148.53
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	6	148.33
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	13	148.2
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	15	147.97
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	4	147.87
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	15	147.28
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	1	147.2
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	1	147.16
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	5	147.11
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	9	147.1
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	3	147.04
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	6	147.03
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	4	146.96
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	8	146.26
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	4	146.0
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	6	145.96
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	5	145.9
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	4	145.26
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	15	145.19
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	9	144.9
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	3	144.66
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	2	144.53
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	6	144.33
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	12	144.14
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1	143.94
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	10	143.93
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	12	142.92
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	8	142.47
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	9	141.21
(1,186)	1:67:B:THR:C	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	11	140.52
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	4	140.43
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	8	140.31
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	8	140.01
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	7	139.84
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	4	139.13
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	12	139.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	7	139.07
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	6	138.85
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	13	138.76
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	9	138.72
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	13	138.26
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	3	138.01
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	12	137.71
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	1	137.69
(1,56)	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	13	137.51
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	14	137.34
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	4	137.06
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	10	136.66
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	5	136.31
(1,185)	1:67:A:THR:C	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1	136.29
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	15	136.16
(1,47)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	11	136.09
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	2	135.72
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	7	135.4
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	15	135.27
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1	134.98
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	7	134.25
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	4	134.17
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	13	134.0
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	14	133.93
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	2	133.88
(1,52)	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	1	133.81
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	9	133.38
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	8	133.15
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	2	133.06
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	15	133.01
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1	132.3
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	5	131.87
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	9	130.99
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	14	129.8
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	5	129.32
(1,51)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	2	129.3
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	3	129.03
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	11	128.55
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	2	128.5
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	12	127.87
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	7	127.79
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	4	127.37
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	3	126.88
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	10	126.64
(1,139)	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	1:43:B:GLU:N	8	126.51
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	5	126.38
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	5	126.13
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	8	125.95
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	14	125.71
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	4	125.68
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	10	125.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	3	124.66
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	7	124.17
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	10	123.84
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	11	123.8
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	2	123.69
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	11	123.49
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	7	122.61
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	11	122.32
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	12	121.04
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	6	120.85
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	12	120.66
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	9	120.65
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	13	120.37
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	14	120.3
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	5	118.68
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	7	118.15
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	6	117.93
(1,55)	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	11	117.82
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	1	117.42
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	8	117.37
(1,140)	1:42:A:LYS:N	1:42:A:LYS:CA	1:42:A:LYS:C	1:43:A:GLU:N	12	117.28
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	2	115.79
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	10	115.41
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	1	114.86
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	2	114.83
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	9	114.64
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	1	114.2
(1,48)	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	3	112.05
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	12	112.04
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	9	109.83
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	11	108.86
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	6	108.77
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	15	108.49
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	13	107.62
(1,144)	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	1	106.7
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	2	106.64
(1,191)	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1:70:A:THR:N	13	106.0
(1,192)	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1:70:B:THR:N	15	105.76
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	5	105.09
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	3	104.86
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	4	103.53
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	14	103.25
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	9	101.8
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	14	101.01
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	12	100.39
(1,143)	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	15	97.86
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	3	97.19
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	8	96.96
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	15	96.62
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	10	95.57
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	2	92.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	14	91.29
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	3	90.73
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	5	89.95
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	10	89.43
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	4	89.19
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	7	87.88
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	14	87.75
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	11	87.6
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	7	87.57
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	12	87.51
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	13	86.83
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	8	86.48
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	9	86.47
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	6	86.01
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	4	85.06
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1	83.67
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	10	83.51
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	13	83.38
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	14	83.33
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1	83.23
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1	82.49
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1	82.33
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	9	81.62
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	10	81.6
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	2	80.27
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	3	80.0
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	12	79.75
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	10	79.5
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	15	79.45
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	9	78.7
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	3	78.44
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	7	78.43
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	12	78.01
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	5	77.28
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	4	77.07
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	11	76.89
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	5	76.78
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	12	76.78
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	3	76.67
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	15	76.67
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	7	76.62
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	7	76.47
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	12	76.4
(1,252)	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	6	76.28
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	1	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	2	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	3	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	4	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	5	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	6	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	7	76.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	8	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	9	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	10	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	11	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	12	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	13	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	14	76.19
(1,255)	1:93:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	15	76.19
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	5	75.94
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	10	75.92
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	4	75.81
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	14	75.72
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	11	75.71
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	14	75.67
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	5	75.25
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	7	75.06
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	2	75.05
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	14	74.97
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	2	74.88
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	5	74.84
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	9	74.62
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	7	74.55
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	13	74.37
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	6	73.19
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	3	73.18
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	6	73.03
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	14	72.88
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	8	72.62
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	8	72.42
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	6	72.34
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	13	72.23
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	6	72.08
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	8	72.02
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	14	71.91
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	8	71.75
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	5	71.14
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1	71.1
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	7	71.04
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	10	70.18
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	6	69.96
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	3	69.88
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	4	69.81
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	2	69.62
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	5	69.61
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	10	69.51
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	3	69.46
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	6	69.18
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	11	69.11
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	7	69.03
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	15	68.84
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	3	68.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	13	68.59
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	2	68.56
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	12	68.54
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	14	68.37
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	3	68.29
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	2	68.05
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	11	68.01
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	4	67.79
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	11	67.58
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	5	67.47
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	11	67.36
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	15	66.83
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	7	66.73
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	15	66.27
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	14	65.73
(1,251)	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	13	65.67
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	10	64.86
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	6	64.69
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	15	64.21
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	13	64.04
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	4	63.62
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	10	63.14
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	11	62.9
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	6	62.58
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	3	62.38
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	7	62.08
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	13	62.03
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	15	61.99
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	4	61.8
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	2	61.51
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	13	61.48
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	2	61.48
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	4	61.43
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	5	61.36
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	5	61.28
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	15	61.19
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	3	60.71
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	4	60.61
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	2	60.56
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	12	59.93
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	2	59.83
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	15	59.8
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	2	59.61
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	4	59.5
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	9	59.48
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	9	59.08
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	12	58.96
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	8	58.93
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	13	58.93
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	11	58.63
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	2	58.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	10	58.46
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	11	58.42
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	14	58.3
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	1	58.13
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	3	57.61
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	7	57.55
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	12	57.32
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	9	57.21
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	3	57.14
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1	57.09
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	4	57.0
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	9	56.85
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1	56.81
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	8	56.79
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	15	56.67
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	6	56.53
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	6	56.13
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	9	55.99
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	8	55.93
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	10	55.93
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	6	55.79
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	3	55.49
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1	55.48
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	12	55.36
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	7	55.21
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	12	55.18
(1,233)	1:87:A:LEU:C	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1	55.1
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	5	54.91
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	13	54.78
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	14	54.65
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	6	54.49
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	4	54.28
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	5	53.59
(1,31)	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	5	53.4
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	2	53.27
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	8	53.18
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	11	53.15
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	11	52.61
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	12	52.51
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	13	52.49
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	15	52.46
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	10	52.44
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	11	52.4
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	11	52.37
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	5	51.89
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	6	51.69
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	11	51.39
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	13	51.38
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	8	51.32
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	8	51.31
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	8	51.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	2	50.93
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1	50.83
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	3	50.71
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	11	50.53
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	14	50.5
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	5	50.31
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	8	50.15
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	6	49.93
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	6	49.9
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	15	49.85
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	6	49.85
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	11	49.65
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	6	49.5
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	8	49.41
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	9	49.02
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	1	48.88
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1	48.76
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	12	48.69
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	2	48.48
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	15	48.3
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	2	48.17
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	11	47.97
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	7	47.93
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	13	47.77
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	15	47.69
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	14	47.49
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	13	47.1
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	13	47.01
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1	46.99
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	3	46.87
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	11	46.64
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	15	46.53
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	7	46.52
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	11	46.44
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	10	46.24
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	2	45.93
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	15	45.91
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	12	45.69
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	4	45.66
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	9	45.59
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	4	45.59
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	6	45.46
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	13	45.41
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	12	45.28
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	3	45.13
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	11	44.88
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	4	44.78
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	9	44.76
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1	44.48
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	13	44.45
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	9	44.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	13	44.13
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	2	44.0
(1,178)	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	2	43.97
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	6	43.95
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	4	43.85
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	8	43.7
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	6	43.49
(1,207)	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	1:77:B:LYS:N	11	43.45
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	5	43.36
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	15	43.34
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	13	43.22
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	9	43.2
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	11	43.2
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	9	43.18
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	9	43.16
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	2	42.99
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	10	42.98
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	7	42.98
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	10	42.93
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	1	42.89
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	5	42.87
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	13	42.69
(1,32)	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	14	42.58
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	1	42.57
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	5	42.37
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	7	42.19
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	13	42.1
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	1	42.06
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	12	42.0
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	12	41.97
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	10	41.91
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	3	41.82
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	9	41.79
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	13	41.56
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	15	41.56
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	4	41.56
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	8	41.51
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1	41.4
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	4	41.37
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	12	41.37
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1	41.22
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	5	41.21
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	10	41.16
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	10	41.12
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	8	41.01
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	13	40.85
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	3	40.56
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	13	40.23
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	12	39.98
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	11	39.95
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	5	39.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	8	39.86
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	6	39.82
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	15	39.81
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	9	39.8
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	1	39.67
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	8	39.59
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	5	39.25
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	11	39.24
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	2	39.1
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	14	39.08
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	9	39.07
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	6	39.05
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	6	38.98
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	12	38.82
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	3	38.8
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	3	38.59
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1	38.49
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	10	38.45
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	2	38.39
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	3	38.39
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	12	38.33
(1,205)	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	9	38.23
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	7	38.18
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	8	38.08
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	5	37.91
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	10	37.89
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	7	37.87
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	9	37.82
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	9	37.75
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	12	37.68
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	5	37.57
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	8	37.42
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	5	37.4
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	7	37.32
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	9	37.1
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	15	37.03
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	2	36.79
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	5	36.7
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	15	36.63
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	12	36.5
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	3	36.46
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	4	36.45
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	13	36.37
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	10	36.3
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	13	36.11
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	11	35.98
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	10	35.93
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	5	35.92
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1	35.86
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	6	35.75
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	15	35.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	6	35.58
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	1	35.37
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	11	35.33
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	2	35.26
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1	35.24
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	12	35.23
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	6	35.11
(1,234)	1:87:B:LEU:C	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	15	35.09
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	9	35.01
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	12	35.0
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	8	34.98
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	1	34.85
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	14	34.66
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	15	34.6
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	2	34.57
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	3	34.49
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	15	34.47
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	14	34.4
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	8	34.39
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	2	34.35
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	13	34.32
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	11	34.28
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	5	34.25
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	9	34.18
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	8	34.06
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	9	34.02
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	5	34.01
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1	33.89
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	2	33.67
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	14	33.66
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	6	33.63
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	3	33.59
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	8	33.57
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	13	33.53
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	14	33.5
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	5	33.5
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	10	33.44
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	1	33.4
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	8	33.4
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	12	33.33
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	7	33.27
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	5	33.27
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	13	33.18
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	7	33.14
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	10	33.02
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	9	32.78
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	8	32.68
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	14	32.63
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	4	32.61
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	2	32.54
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	6	32.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	10	32.33
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	15	32.31
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	7	32.28
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	9	32.26
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	13	32.22
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	10	32.05
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	12	31.97
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	11	31.96
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1	31.95
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	10	31.81
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	14	31.59
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	13	31.59
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	7	31.56
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	15	31.5
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	2	31.49
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	12	31.49
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	4	31.46
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	15	31.43
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	1	31.37
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	10	31.11
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	8	30.77
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	14	30.76
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	5	30.58
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	3	30.58
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	7	30.57
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	9	30.56
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	3	30.56
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	6	30.55
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	13	30.51
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	5	30.49
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	5	30.47
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	9	30.36
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	11	30.35
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	6	30.26
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	3	30.21
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	11	30.13
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	9	30.07
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	15	30.01
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	15	29.94
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	11	29.9
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	14	29.89
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	10	29.86
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	3	29.86
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	4	29.66
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	13	29.56
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	14	29.53
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	12	29.51
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	2	29.41
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	11	29.35
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	3	29.34
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	6	29.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	10	29.28
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	4	29.21
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	10	29.18
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	7	29.18
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	13	29.17
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1	29.05
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	9	29.02
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	2	29.0
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	6	28.98
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	9	28.98
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	14	28.94
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	4	28.89
(1,207)	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	1:77:B:LYS:N	10	28.8
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	14	28.67
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	11	28.65
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	11	28.64
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	14	28.61
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	3	28.57
(1,235)	1:88:A:LYS:N	1:88:A:LYS:CA	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	5	28.43
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	12	28.23
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	5	28.11
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	7	28.08
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	5	28.04
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	2	28.0
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	7	27.93
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	7	27.87
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	11	27.83
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	6	27.77
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	14	27.75
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	14	27.73
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	10	27.73
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	15	27.72
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	9	27.71
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	7	27.7
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	15	27.68
(1,217)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	2	27.67
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	5	27.66
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	15	27.62
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	4	27.58
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	13	27.44
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1	27.43
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	6	27.32
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	6	27.3
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	11	27.29
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	3	27.2
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	15	27.09
(1,214)	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	9	26.96
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	6	26.91
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	1	26.87
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	4	26.76
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	3	26.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	14	26.7
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	9	26.7
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	7	26.69
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	6	26.69
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	9	26.63
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	15	26.62
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	5	26.61
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	10	26.55
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	3	26.4
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	9	26.25
(1,204)	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	12	26.24
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	14	26.14
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	3	26.12
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	12	26.07
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	13	26.05
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	7	25.99
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	6	25.69
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	15	25.68
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	3	25.65
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	7	25.61
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	5	25.55
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	11	25.36
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	10	25.28
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	6	25.27
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	13	25.27
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	7	25.24
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	14	25.23
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	10	25.18
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	7	25.16
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	2	25.08
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	4	25.07
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	15	25.07
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	14	25.07
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	15	24.99
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	14	24.96
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	13	24.96
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	11	24.94
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	15	24.9
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	9	24.85
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	6	24.83
(1,29)	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	1:14:B:PHE:CA	1:14:B:PHE:C	11	24.83
(1,177)	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1	24.75
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	3	24.75
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	11	24.74
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	7	24.68
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	15	24.61
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	7	24.59
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	9	24.57
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	2	24.57
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	7	24.35
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	2	24.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1	24.24
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	4	24.23
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	5	24.17
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	10	24.12
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	8	23.97
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	13	23.92
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	12	23.92
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	9	23.89
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	13	23.85
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	13	23.84
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	2	23.82
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	7	23.82
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	8	23.74
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	9	23.72
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	9	23.68
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	2	23.62
(1,225)	1:81:B:PHE:C	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	2	23.62
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	2	23.56
(1,204)	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	1	23.52
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	8	23.48
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	6	23.46
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	4	23.43
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	3	23.41
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1	23.36
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	11	23.34
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	13	23.28
(1,200)	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	15	23.2
(1,49)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	5	23.19
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	12	23.17
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	13	23.14
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1	23.09
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	8	23.07
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	9	23.04
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	12	22.99
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	2	22.98
(1,225)	1:81:B:PHE:C	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	8	22.96
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	2	22.94
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	8	22.94
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	15	22.91
(1,146)	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	14	22.9
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	10	22.85
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	11	22.83
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	7	22.81
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1	22.8
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	1	22.77
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	10	22.76
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	11	22.74
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	12	22.7
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	3	22.69
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	6	22.67
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	5	22.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	10	22.62
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	15	22.61
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	7	22.6
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	6	22.57
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	3	22.56
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	4	22.55
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	12	22.53
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	8	22.49
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	11	22.46
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	12	22.45
(1,146)	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	9	22.39
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	10	22.34
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	11	22.34
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	15	22.26
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	10	22.25
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	4	22.25
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	13	22.24
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	4	22.24
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	11	22.21
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	14	22.2
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	9	22.2
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	8	22.19
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	2	22.17
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	8	22.15
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	2	22.1
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	7	22.1
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	9	22.09
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	8	22.05
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	10	21.92
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	12	21.9
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	2	21.89
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	4	21.89
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	6	21.89
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	9	21.88
(1,217)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	9	21.86
(1,157)	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	12	21.86
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	12	21.76
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1	21.74
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	7	21.74
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	6	21.72
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	2	21.65
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	3	21.62
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	14	21.49
(1,13)	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	10	21.49
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	4	21.47
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	14	21.44
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	3	21.43
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	15	21.37
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	4	21.31
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	7	21.2
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	6	21.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	4	21.07
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	9	21.03
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	7	21.01
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	2	21.01
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	6	20.98
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	9	20.97
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	6	20.95
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	6	20.92
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	15	20.88
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	8	20.87
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	9	20.87
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	8	20.86
(1,166)	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	3	20.82
(1,159)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	11	20.8
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	3	20.74
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	1	20.73
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	4	20.71
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	9	20.67
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	5	20.6
(1,50)	1:19:B:SER:C	1:20:B:LYS:N	1:20:B:LYS:CA	1:20:B:LYS:C	13	20.59
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	15	20.56
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	6	20.54
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	14	20.51
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	6	20.42
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	9	20.41
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	13	20.36
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	4	20.35
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	1	20.32
(1,42)	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	9	20.32
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	5	20.31
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	8	20.21
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	1	20.18
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	8	20.16
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	11	20.15
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	15	20.13
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	6	20.08
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	5	19.97
(1,114)	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	7	19.95
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	1	19.95
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	12	19.95
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	6	19.95
(1,211)	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	10	19.87
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	12	19.82
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	5	19.8
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	3	19.79
(1,136)	1:41:B:GLY:N	1:41:B:GLY:CA	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	15	19.79
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	11	19.79
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	4	19.78
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	13	19.74
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	13	19.73
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	7	19.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,215)	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	9	19.65
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	6	19.63
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	5	19.61
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1	19.56
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	15	19.55
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	7	19.53
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	9	19.52
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	10	19.52
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	10	19.51
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	1	19.49
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	12	19.48
(1,131)	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	12	19.46
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1	19.43
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	8	19.41
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	11	19.4
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	6	19.39
(1,146)	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	15	19.39
(1,108)	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	13	19.35
(1,59)	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	11	19.34
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	12	19.31
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	6	19.17
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	3	19.16
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	10	19.14
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	8	19.14
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	4	19.1
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	7	19.09
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	7	19.06
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	8	19.04
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	4	19.04
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	12	19.01
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	13	18.99
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	13	18.99
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	14	18.94
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	1	18.92
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	15	18.9
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	7	18.89
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	9	18.87
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1	18.85
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	1	18.84
(1,207)	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	1:77:B:LYS:N	6	18.8
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	11	18.77
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	6	18.71
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	11	18.7
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	4	18.67
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	14	18.66
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	4	18.61
(1,184)	1:64:A:ASN:N	1:64:A:ASN:CA	1:64:A:ASN:C	1:65:A:PRO:N	6	18.6
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	2	18.59
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	7	18.59
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1	18.56
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	15	18.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	15	18.38
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	8	18.38
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	11	18.37
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	11	18.35
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	9	18.3
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	3	18.29
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	1	18.21
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	7	18.21
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	5	18.2
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	6	18.19
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	10	18.17
(1,40)	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	8	18.17
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	14	18.15
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	6	18.14
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	3	18.13
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	4	18.13
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	3	18.12
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	3	18.1
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	5	18.1
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	12	18.08
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	8	18.08
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	10	18.07
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	13	18.05
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	4	18.03
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	6	18.03
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	9	18.02
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	15	18.01
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	15	17.97
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	10	17.95
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	13	17.94
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	8	17.92
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	2	17.86
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	3	17.84
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	15	17.84
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	2	17.83
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	2	17.79
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	2	17.74
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	13	17.71
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	7	17.67
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	10	17.63
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1	17.63
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	15	17.62
(1,121)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	14	17.56
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	9	17.56
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	2	17.48
(1,193)	1:72:B:LYS:C	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	13	17.48
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	3	17.47
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	8	17.4
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	8	17.4
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	11	17.38
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	7	17.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	5	17.33
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	12	17.28
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	7	17.26
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	10	17.23
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1	17.2
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1	17.15
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	8	17.13
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	15	17.1
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	11	17.06
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	13	17.05
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	13	17.04
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	6	17.03
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	7	17.03
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	10	17.01
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	4	16.96
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	15	16.93
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	10	16.87
(1,215)	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	2	16.85
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	14	16.83
(1,36)	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	15	16.83
(1,165)	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	14	16.82
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	4	16.8
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	14	16.79
(1,114)	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	10	16.76
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	3	16.73
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	9	16.73
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	10	16.73
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	9	16.7
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	9	16.64
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	6	16.63
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	7	16.63
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	6	16.63
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	10	16.62
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	7	16.62
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	12	16.62
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	8	16.54
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	4	16.53
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	10	16.52
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	3	16.44
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	2	16.34
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	13	16.31
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	5	16.31
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	9	16.3
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	11	16.29
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	2	16.28
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	8	16.26
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	2	16.25
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	7	16.23
(1,11)	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	8	16.23
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	7	16.23
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	1	16.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	8	16.16
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	15	16.16
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	8	16.13
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	10	16.09
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	12	16.06
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	3	16.05
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	14	16.03
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	6	15.98
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	5	15.98
(1,204)	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	5	15.96
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	11	15.94
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	14	15.91
(1,148)	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	13	15.91
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	10	15.89
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	10	15.89
(1,242)	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	12	15.87
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	8	15.87
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	14	15.83
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	5	15.77
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	11	15.76
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1	15.69
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	15	15.68
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	6	15.67
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	10	15.62
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	5	15.6
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	9	15.6
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	6	15.59
(1,158)	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	13	15.57
(1,39)	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	9	15.57
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	2	15.55
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	2	15.54
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	11	15.53
(1,39)	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	10	15.53
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	11	15.49
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	1	15.47
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	11	15.44
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	4	15.44
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	6	15.44
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	4	15.42
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	11	15.41
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	2	15.4
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	4	15.34
(1,98)	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	11	15.33
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	1	15.32
(1,46)	1:18:B:LEU:C	1:19:B:SER:N	1:19:B:SER:CA	1:19:B:SER:C	8	15.31
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	4	15.27
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	2	15.26
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	10	15.25
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	8	15.24
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	7	15.21
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1	15.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	3	15.18
(1,11)	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	6	15.18
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	2	15.17
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	13	15.16
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	5	15.15
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	2	15.12
(1,146)	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	4	15.12
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	3	15.09
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	4	15.07
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	13	15.05
(1,157)	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	9	15.04
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	5	15.03
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	6	15.03
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	2	15.02
(1,53)	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	13	15.01
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	4	15.0
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	13	14.99
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	3	14.98
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	1	14.94
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	6	14.93
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	5	14.93
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	6	14.88
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	8	14.86
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	14	14.85
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	2	14.84
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	9	14.83
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	5	14.83
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	9	14.8
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	7	14.78
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	4	14.75
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	2	14.75
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	5	14.73
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	4	14.72
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	9	14.71
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	5	14.63
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	14	14.6
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	5	14.59
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	13	14.54
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	2	14.54
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1	14.52
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	4	14.49
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	14	14.49
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	11	14.46
(1,199)	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	10	14.43
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	4	14.43
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	5	14.41
(1,152)	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	13	14.39
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	8	14.37
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	3	14.37
(1,11)	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	3	14.37
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	15	14.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	10	14.27
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	15	14.27
(1,236)	1:88:B:LYS:N	1:88:B:LYS:CA	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	7	14.23
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	9	14.23
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	8	14.19
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1	14.18
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	2	14.13
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	13	14.13
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	13	14.11
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	15	14.11
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	8	14.1
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	6	14.09
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	3	14.09
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	11	14.07
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	15	14.07
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1	14.04
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	2	14.03
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	5	14.03
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	14	14.02
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	8	14.01
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	8	13.92
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	8	13.91
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	7	13.87
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	15	13.87
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	13	13.86
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	14	13.81
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	9	13.78
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	2	13.75
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	13	13.74
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	11	13.7
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	5	13.7
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	14	13.7
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	10	13.68
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	4	13.65
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	8	13.64
(1,204)	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	10	13.63
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	14	13.61
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	13	13.6
(1,184)	1:64:A:ASN:N	1:64:A:ASN:CA	1:64:A:ASN:C	1:65:A:PRO:N	12	13.55
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	5	13.54
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	9	13.51
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	11	13.5
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	9	13.5
(1,77)	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	4	13.48
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	6	13.46
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	11	13.44
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	6	13.39
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	14	13.39
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	2	13.34
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	4	13.32
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	13	13.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1	13.29
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	15	13.28
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	3	13.27
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	11	13.25
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	15	13.24
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	1	13.22
(1,147)	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1	13.2
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	13	13.18
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	5	13.16
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	8	13.12
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	5	13.11
(1,217)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	4	13.09
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	15	13.09
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	12	13.08
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	7	13.04
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	10	13.03
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	13	13.02
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	9	13.01
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1	13.0
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	5	12.98
(1,98)	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	2	12.96
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	13	12.95
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	6	12.94
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	8	12.91
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	14	12.9
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	13	12.87
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	7	12.84
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	11	12.84
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	8	12.81
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	6	12.79
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	8	12.76
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	5	12.76
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	12	12.73
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	9	12.71
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	6	12.67
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	5	12.65
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	14	12.63
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	6	12.63
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	5	12.62
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	9	12.61
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	9	12.6
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	14	12.59
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1	12.59
(1,15)	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	10	12.59
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	4	12.58
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	2	12.55
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	6	12.54
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	12	12.54
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	12	12.53
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1	12.53
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	12	12.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	10	12.47
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	5	12.47
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	5	12.45
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	10	12.42
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	7	12.39
(1,11)	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	4	12.37
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	14	12.36
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	3	12.35
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	15	12.34
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	14	12.33
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	10	12.31
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	14	12.31
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	3	12.31
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	3	12.29
(1,71)	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	10	12.29
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	8	12.28
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	13	12.23
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	5	12.23
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1	12.23
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	8	12.19
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	2	12.15
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	15	12.14
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	4	12.11
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	5	12.11
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	2	12.11
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	7	12.1
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	4	12.1
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	13	12.06
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	1	12.05
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1	12.04
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	11	12.01
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	11	11.99
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	8	11.98
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	10	11.98
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	14	11.96
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	9	11.95
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1	11.95
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	14	11.94
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	10	11.93
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	13	11.9
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	13	11.89
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	3	11.89
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	14	11.86
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	7	11.86
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	12	11.83
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	3	11.83
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	3	11.83
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	1	11.81
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	9	11.8
(1,98)	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	12	11.74
(1,7)	1:8:B:ALA:N	1:8:B:ALA:CA	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	7	11.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	4	11.68
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1	11.68
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	13	11.61
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	12	11.6
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	3	11.57
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	13	11.57
(1,8)	1:8:A:ALA:N	1:8:A:ALA:CA	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	12	11.57
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	12	11.53
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	6	11.53
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	12	11.51
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	9	11.49
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	8	11.49
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	12	11.48
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	12	11.46
(1,79)	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	1:28:A:ASN:N	2	11.46
(1,131)	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	9	11.44
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	4	11.42
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	13	11.41
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	2	11.41
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	9	11.39
(1,79)	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	1:28:A:ASN:N	14	11.36
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	5	11.35
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	2	11.34
(1,53)	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	11	11.33
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	14	11.32
(1,67)	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	13	11.32
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	11	11.3
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	7	11.27
(1,168)	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	3	11.25
(1,79)	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	1:28:A:ASN:N	8	11.23
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	10	11.22
(1,183)	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	1:65:B:PRO:N	5	11.2
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	5	11.19
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	8	11.18
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	12	11.18
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	15	11.14
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	5	11.13
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	4	11.13
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	15	11.03
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	2	11.02
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	3	10.99
(1,158)	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	11	10.99
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	11	10.95
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1	10.92
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	9	10.92
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	7	10.91
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	9	10.9
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	12	10.9
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1	10.9
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	8	10.89
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	12	10.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	2	10.88
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1	10.86
(1,204)	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	11	10.85
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	14	10.83
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	15	10.83
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	10	10.82
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	3	10.82
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	4	10.78
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	8	10.77
(1,204)	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1:76:B:SER:N	8	10.76
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	15	10.76
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	9	10.75
(1,71)	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	11	10.74
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	5	10.73
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	6	10.72
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	14	10.71
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	12	10.69
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	4	10.68
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	12	10.65
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	8	10.65
(1,224)	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	1:82:B:LYS:N	2	10.64
(1,206)	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	15	10.62
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	3	10.58
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	13	10.57
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	3	10.55
(1,8)	1:8:A:ALA:N	1:8:A:ALA:CA	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	14	10.55
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	12	10.54
(1,159)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	13	10.51
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	14	10.51
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	10	10.5
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	7	10.49
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	7	10.45
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	4	10.42
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	4	10.42
(1,183)	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	1:65:B:PRO:N	8	10.38
(1,30)	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	1:14:A:PHE:CA	1:14:A:PHE:C	8	10.38
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	8	10.37
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	8	10.33
(1,15)	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	9	10.33
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	6	10.31
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	9	10.3
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	2	10.3
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	11	10.28
(1,121)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	3	10.27
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1	10.27
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	10	10.26
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	6	10.24
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	5	10.2
(1,247)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	14	10.17
(1,36)	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	13	10.17
(1,168)	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1	10.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,71)	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	4	10.13
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	9	10.12
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	4	10.12
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	15	10.11
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	12	10.11
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	4	10.1
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	15	10.1
(1,108)	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	7	10.08
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	13	10.04
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	15	10.03
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	6	10.01
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1	10.0
(1,214)	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	3	9.98
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	10	9.97
(1,232)	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	1:86:B:GLN:N	7	9.96
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1	9.95
(1,80)	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	10	9.94
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	11	9.89
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	10	9.87
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	2	9.87
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	12	9.85
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	13	9.84
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	11	9.82
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	15	9.82
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	3	9.82
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	11	9.81
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	14	9.78
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	13	9.76
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	13	9.75
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	11	9.74
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	7	9.73
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	4	9.73
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	7	9.72
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	9	9.72
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1	9.71
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	4	9.68
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	5	9.65
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	12	9.63
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	12	9.63
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	4	9.63
(1,159)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	14	9.62
(1,254)	1:92:A:ASN:C	1:93:A:ASN:N	1:93:A:ASN:CA	1:93:A:ASN:C	2	9.61
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	5	9.6
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	13	9.59
(1,247)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	2	9.55
(1,13)	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	15	9.52
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	2	9.48
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	4	9.47
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	10	9.46
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	6	9.43
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	13	9.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	15	9.37
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1	9.33
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	5	9.32
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	3	9.31
(1,249)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	1:92:B:ASN:CA	1:92:B:ASN:C	4	9.29
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	10	9.28
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	3	9.28
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	12	9.28
(1,77)	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	14	9.25
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	12	9.24
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	10	9.23
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	5	9.2
(1,194)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	5	9.2
(1,216)	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	7	9.17
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	5	9.15
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	11	9.15
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	5	9.14
(1,198)	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	9	9.07
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	9	9.07
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	13	9.05
(1,89)	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	3	9.05
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	5	9.04
(1,83)	1:28:B:ASN:N	1:28:B:ASN:CA	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	15	9.04
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	12	9.03
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	13	9.01
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	15	9.01
(1,214)	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	10	8.99
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	11	8.96
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	15	8.94
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	6	8.92
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	13	8.88
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	15	8.88
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	5	8.87
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	12	8.86
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	12	8.85
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	3	8.85
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	13	8.82
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	8	8.79
(1,84)	1:28:A:ASN:N	1:28:A:ASN:CA	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	4	8.79
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	7	8.79
(1,11)	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	9	8.79
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	13	8.74
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	9	8.71
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	15	8.7
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	14	8.7
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	11	8.69
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	13	8.69
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	6	8.65
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	11	8.65
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	2	8.63
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	6	8.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	8	8.63
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	4	8.61
(1,174)	1:60:A:ARG:C	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	12	8.59
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	2	8.55
(1,170)	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	3	8.53
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	10	8.53
(1,151)	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	1:55:B:THR:N	1	8.52
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	2	8.49
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	5	8.49
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	11	8.47
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	2	8.46
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	8	8.45
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	6	8.45
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	2	8.45
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	10	8.44
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	7	8.35
(1,159)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	3	8.34
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	5	8.34
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	5	8.33
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	14	8.33
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	11	8.31
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	7	8.31
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	3	8.3
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	5	8.29
(1,141)	1:51:A:LYS:C	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	10	8.28
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	7	8.27
(1,7)	1:8:B:ALA:N	1:8:B:ALA:CA	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	8	8.27
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	13	8.25
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	6	8.24
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	15	8.23
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	3	8.2
(1,148)	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	2	8.17
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	9	8.13
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	1	8.13
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	10	8.11
(1,26)	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	10	8.11
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	11	8.11
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	3	8.1
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	13	8.09
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	7	8.06
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	3	8.02
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	10	8.02
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	2	8.01
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	4	8.0
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	2	7.99
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	8	7.97
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	4	7.96
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	4	7.96
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	6	7.95
(1,25)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	10	7.95
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	13	7.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	6	7.93
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	7	7.93
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	10	7.93
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	12	7.92
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	12	7.91
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	11	7.91
(1,121)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	8	7.9
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	11	7.9
(1,149)	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	9	7.89
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	8	7.88
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	8	7.86
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	8	7.85
(1,197)	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	7	7.84
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	7	7.84
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	9	7.81
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	9	7.8
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	7	7.8
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	8	7.78
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	5	7.77
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	15	7.77
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	2	7.75
(1,225)	1:81:B:PHE:C	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	10	7.74
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	10	7.74
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	15	7.73
(1,39)	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	8	7.72
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	14	7.71
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	3	7.7
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	9	7.68
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	5	7.66
(1,226)	1:81:A:PHE:C	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	11	7.65
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	11	7.63
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	12	7.6
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	10	7.59
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	10	7.59
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	9	7.54
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	2	7.54
(1,8)	1:8:A:ALA:N	1:8:A:ALA:CA	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	5	7.52
(1,209)	1:77:A:LYS:C	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	10	7.51
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	7	7.49
(1,157)	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	2	7.46
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	15	7.46
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	15	7.41
(1,141)	1:51:A:LYS:C	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	15	7.39
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	9	7.38
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	9	7.36
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	7	7.34
(1,67)	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	8	7.34
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	5	7.33
(1,148)	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	11	7.31
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	13	7.31
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	6	7.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	15	7.29
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	15	7.28
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	8	7.28
(1,14)	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	11	7.28
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	5	7.24
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	3	7.22
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	15	7.2
(1,247)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	4	7.18
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	13	7.17
(1,197)	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	1:74:B:PRO:CA	1:74:B:PRO:C	12	7.16
(1,132)	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1:41:A:GLY:N	1	7.16
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	15	7.16
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	6	7.16
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	3	7.15
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1	7.15
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	6	7.15
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	1	7.15
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	10	7.13
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	13	7.12
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	4	7.12
(1,244)	1:90:B:ASP:N	1:90:B:ASP:CA	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	6	7.09
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	12	7.08
(1,196)	1:73:A:ILE:N	1:73:A:ILE:CA	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	5	7.05
(1,151)	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	1:55:B:THR:N	8	7.04
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	15	7.0
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	11	6.99
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	5	6.98
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	9	6.94
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	7	6.94
(1,131)	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	11	6.93
(1,104)	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	8	6.92
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	15	6.91
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	5	6.91
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	4	6.91
(1,15)	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	13	6.9
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	2	6.89
(1,123)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	13	6.88
(1,123)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	4	6.86
(1,211)	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	14	6.85
(1,114)	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	6	6.85
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	12	6.85
(1,15)	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	6	6.81
(1,214)	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	6	6.8
(1,141)	1:51:A:LYS:C	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	14	6.8
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	3	6.8
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	5	6.8
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	8	6.79
(1,36)	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	2	6.79
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	3	6.78
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	4	6.76
(1,53)	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	8	6.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	1:8:A:ALA:CA	1:8:A:ALA:C	5	6.76
(1,216)	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1	6.74
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	14	6.73
(1,112)	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	7	6.73
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	7	6.72
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	15	6.71
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	7	6.7
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	6	6.7
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	7	6.7
(1,79)	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	1:28:A:ASN:N	9	6.66
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	11	6.65
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	15	6.64
(1,104)	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	9	6.63
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	14	6.62
(1,77)	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	9	6.62
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	7	6.62
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	12	6.61
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	14	6.6
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	2	6.58
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	14	6.51
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	4	6.51
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	13	6.5
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	9	6.48
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	10	6.48
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	15	6.47
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	6	6.47
(1,91)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	12	6.45
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	10	6.43
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	9	6.41
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	6	6.4
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	9	6.39
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	8	6.36
(1,153)	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	11	6.34
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	12	6.32
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	8	6.32
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	14	6.32
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	11	6.31
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	7	6.29
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	15	6.29
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	13	6.28
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	15	6.28
(1,104)	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	14	6.24
(1,152)	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	2	6.23
(1,59)	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	15	6.23
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	11	6.23
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	1	6.22
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	5	6.21
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	13	6.2
(1,80)	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	8	6.19
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	2	6.18
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	2	6.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,41)	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	8	6.12
(1,211)	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	8	6.11
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	2	6.1
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	5	6.09
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	3	6.09
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	3	6.09
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	9	6.05
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	3	6.05
(1,15)	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1	6.05
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	11	6.03
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	6	6.0
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	2	5.98
(1,169)	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	12	5.97
(1,67)	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	7	5.95
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	15	5.95
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	3	5.94
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	8	5.89
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	11	5.88
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	5	5.87
(1,67)	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	14	5.87
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	13	5.85
(1,39)	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	1:17:B:VAL:N	7	5.83
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	4	5.81
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	3	5.8
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	1	5.8
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	5	5.78
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	4	5.77
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	3	5.76
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	5	5.75
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	14	5.74
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	9	5.73
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	9	5.72
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	11	5.71
(1,209)	1:77:A:LYS:C	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	12	5.7
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	1	5.68
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	4	5.68
(1,27)	1:13:A:LYS:N	1:13:A:LYS:CA	1:13:A:LYS:C	1:14:A:PHE:N	13	5.66
(1,161)	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	6	5.65
(1,59)	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	3	5.65
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	2	5.64
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1	5.64
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	11	5.64
(1,11)	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	2	5.63
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	10	5.6
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	5	5.57
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	6	5.56
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	5	5.56
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	15	5.55
(1,21)	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1	5.54
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	3	5.51
(1,93)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	6	5.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	9	5.51
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	6	5.51
(1,217)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	12	5.49
(1,79)	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	1:28:A:ASN:N	1	5.49
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	10	5.48
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	11	5.46
(1,158)	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	9	5.44
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	12	5.43
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	5	5.43
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	8	5.41
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	1	5.4
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	9	5.39
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	6	5.38
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	13	5.38
(1,181)	1:63:B:ARG:C	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	6	5.36
(1,247)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	15	5.35
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	1	5.35
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	12	5.32
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	12	5.31
(1,211)	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	2	5.3
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	13	5.3
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	8	5.29
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	8	5.28
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	10	5.28
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	15	5.28
(1,131)	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	10	5.27
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	12	5.27
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	12	5.27
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	11	5.23
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	7	5.22
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	10	5.21
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	11	5.18
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	10	5.18
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	13	5.17
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	7	5.15
(1,80)	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	5	5.11
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	5	5.11
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	13	5.1
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	4	5.08
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	13	5.08
(1,211)	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	11	5.07
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	12	5.06
(1,87)	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	10	5.03
(1,40)	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	1:17:A:VAL:N	7	5.03
(1,168)	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	8	5.02
(1,112)	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	8	5.02
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	5	5.01
(1,163)	1:57:A:ARG:N	1:57:A:ARG:CA	1:57:A:ARG:C	1:58:A:ALA:N	8	5.0
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	13	5.0
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	6	5.0
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	8	4.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	13	4.99
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	6	4.97
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	4	4.97
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	4	4.97
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	3	4.96
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	10	4.93
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	7	4.91
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	4	4.91
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	4	4.89
(1,131)	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	1:41:B:GLY:N	13	4.89
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	10	4.89
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	4	4.87
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	12	4.86
(1,23)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:LYS:N	14	4.86
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	15	4.85
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	7	4.84
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	7	4.84
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	6	4.84
(1,253)	1:92:B:ASN:C	1:93:B:ASN:N	1:93:B:ASN:CA	1:93:B:ASN:C	14	4.83
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	2	4.83
(1,108)	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	5	4.8
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	9	4.78
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	14	4.78
(1,182)	1:63:A:ARG:C	1:64:A:ASN:N	1:64:A:ASN:CA	1:64:A:ASN:C	2	4.77
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	3	4.77
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	7	4.77
(1,216)	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	14	4.75
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	6	4.75
(1,92)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:PHE:N	11	4.75
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	7	4.75
(1,137)	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	13	4.74
(1,141)	1:51:A:LYS:C	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	2	4.73
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	12	4.72
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	13	4.71
(1,167)	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	13	4.69
(1,120)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	8	4.68
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	15	4.68
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	4	4.68
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	3	4.67
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	12	4.66
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	4	4.66
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1	4.66
(1,13)	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	8	4.66
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1	4.63
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	9	4.63
(1,176)	1:61:A:ASP:N	1:61:A:ASP:CA	1:61:A:ASP:C	1:62:A:GLY:N	1	4.62
(1,207)	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	1:77:B:LYS:N	9	4.6
(1,147)	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	9	4.58
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	9	4.57
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	2	4.55
(1,218)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	12	4.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,158)	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	15	4.54
(1,108)	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	6	4.53
(1,232)	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	1:86:B:GLN:N	2	4.5
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	7	4.5
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1	4.5
(1,214)	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	13	4.47
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	14	4.44
(1,151)	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	1:55:B:THR:N	12	4.43
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	11	4.4
(1,219)	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	5	4.39
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	9	4.39
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	14	4.39
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	14	4.36
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	8	4.36
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	3	4.34
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	7	4.34
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	5	4.34
(1,212)	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	14	4.33
(1,123)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	14	4.3
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1	4.3
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	14	4.29
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	11	4.27
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1	4.27
(1,232)	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	1:86:B:GLN:N	9	4.24
(1,147)	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	13	4.24
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	6	4.24
(1,89)	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	11	4.23
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	15	4.23
(1,118)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	3	4.22
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	13	4.21
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	4	4.21
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	11	4.2
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	14	4.2
(1,213)	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	1:79:A:ALA:CA	1:79:A:ALA:C	1	4.19
(1,151)	1:54:B:VAL:N	1:54:B:VAL:CA	1:54:B:VAL:C	1:55:B:THR:N	5	4.18
(1,68)	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	11	4.18
(1,181)	1:63:B:ARG:C	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	9	4.17
(1,145)	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	2	4.17
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	6	4.16
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	13	4.15
(1,112)	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	6	4.13
(1,214)	1:78:B:SER:C	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	14	4.12
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	2	4.11
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	15	4.1
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	2	4.1
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	15	4.08
(1,225)	1:81:B:PHE:C	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	13	4.06
(1,164)	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	1:58:B:ALA:N	3	4.04
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	15	4.03
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	11	4.03
(1,36)	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	5	4.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	10	4.03
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	3	3.99
(1,36)	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	3	3.99
(1,19)	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	1:12:A:GLU:N	11	3.99
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	7	3.98
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	3	3.97
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	3	3.96
(1,67)	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	9	3.95
(1,67)	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	12	3.95
(1,217)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	3	3.94
(1,54)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	13	3.93
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	5	3.92
(1,245)	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	5	3.91
(1,112)	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	14	3.91
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	10	3.9
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	9	3.89
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	14	3.89
(1,84)	1:28:A:ASN:N	1:28:A:ASN:CA	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	5	3.88
(1,190)	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	1:69:B:GLU:CA	1:69:B:GLU:C	13	3.85
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	14	3.85
(1,145)	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	4	3.84
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	7	3.83
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	3	3.83
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	10	3.82
(1,13)	1:9:A:GLN:C	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	4	3.82
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	14	3.81
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	14	3.81
(1,120)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	2	3.78
(1,114)	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	9	3.78
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	15	3.78
(1,142)	1:51:B:LYS:C	1:52:B:PHE:N	1:52:B:PHE:CA	1:52:B:PHE:C	2	3.74
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	2	3.74
(1,119)	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	7	3.73
(1,145)	1:52:B:PHE:C	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	10	3.7
(1,28)	1:13:B:LYS:N	1:13:B:LYS:CA	1:13:B:LYS:C	1:14:B:PHE:N	2	3.7
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	15	3.68
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	12	3.68
(1,75)	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	1	3.68
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	15	3.66
(1,15)	1:10:A:ILE:N	1:10:A:ILE:CA	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	2	3.66
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	9	3.64
(1,99)	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	2	3.63
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	2	3.63
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	14	3.6
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	9	3.59
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	5	3.58
(1,64)	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	4	3.58
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	11	3.54
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	6	3.54
(1,167)	1:58:A:ALA:N	1:58:A:ALA:CA	1:58:A:ALA:C	1:59:A:ALA:N	12	3.53
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	8	3.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,20)	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	2	3.5
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	10	3.48
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	8	3.48
(1,43)	1:17:A:VAL:N	1:17:A:VAL:CA	1:17:A:VAL:C	1:18:A:LEU:N	9	3.48
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	14	3.47
(1,168)	1:58:B:ALA:N	1:58:B:ALA:CA	1:58:B:ALA:C	1:59:B:ALA:N	13	3.44
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	4	3.44
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	11	3.44
(1,135)	1:41:A:GLY:N	1:41:A:GLY:CA	1:41:A:GLY:C	1:42:A:LYS:N	6	3.43
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	1	3.43
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	15	3.43
(1,189)	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	1:69:A:GLU:CA	1:69:A:GLU:C	8	3.41
(1,58)	1:21:B:THR:C	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	7	3.39
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	3	3.37
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	15	3.35
(1,60)	1:22:B:HIS:N	1:22:B:HIS:CA	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	10	3.35
(1,121)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	10	3.34
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	9	3.34
(1,209)	1:77:A:LYS:C	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	14	3.32
(1,183)	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	1:65:B:PRO:N	1	3.32
(1,137)	1:41:B:GLY:C	1:42:B:LYS:N	1:42:B:LYS:CA	1:42:B:LYS:C	11	3.32
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	10	3.32
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	6	3.32
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	3	3.31
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	11	3.31
(1,36)	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	6	3.29
(1,130)	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	1:40:A:ALA:CA	1:40:A:ALA:C	5	3.28
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	14	3.28
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	12	3.27
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	5	3.26
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	3	3.26
(1,201)	1:74:A:PRO:C	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	2	3.25
(1,226)	1:81:A:PHE:C	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	6	3.24
(1,79)	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	1:28:A:ASN:N	6	3.24
(1,175)	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	1:62:B:GLY:N	4	3.23
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	1	3.23
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	13	3.2
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	15	3.2
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	6	3.2
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	1	3.2
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	5	3.17
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	13	3.16
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	14	3.16
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	11	3.16
(1,10)	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	11	3.15
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	13	3.14
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1	3.13
(1,98)	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	8	3.12
(1,74)	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	3	3.12
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	5	3.11
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	15	3.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,171)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ARG:N	11	3.11
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	7	3.11
(1,34)	1:14:B:PHE:C	1:15:B:THR:N	1:15:B:THR:CA	1:15:B:THR:C	12	3.1
(1,113)	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	11	3.09
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	5	3.09
(1,62)	1:22:B:HIS:C	1:23:B:ALA:N	1:23:B:ALA:CA	1:23:B:ALA:C	13	3.07
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	12	3.06
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	14	3.05
(1,121)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	13	3.05
(1,152)	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	6	3.02
(1,246)	1:90:B:ASP:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	6	3.01
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	3	3.0
(1,69)	1:24:A:GLU:C	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	12	3.0
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1	2.98
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	12	2.97
(1,45)	1:18:A:LEU:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	8	2.96
(1,250)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	1:92:A:ASN:CA	1:92:A:ASN:C	4	2.94
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	11	2.93
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	10	2.93
(1,59)	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	8	2.92
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	10	2.92
(1,207)	1:76:B:SER:N	1:76:B:SER:CA	1:76:B:SER:C	1:77:B:LYS:N	2	2.9
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	9	2.89
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	10	2.86
(1,113)	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	14	2.85
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	14	2.85
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	9	2.84
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	11	2.84
(1,227)	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ALA:N	7	2.83
(1,157)	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	3	2.83
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	13	2.8
(1,184)	1:64:A:ASN:N	1:64:A:ASN:CA	1:64:A:ASN:C	1:65:A:PRO:N	2	2.8
(1,119)	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	11	2.78
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	4	2.78
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	12	2.74
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	6	2.73
(1,221)	1:80:A:LYS:C	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	15	2.72
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	15	2.72
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	10	2.71
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	3	2.7
(1,63)	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	11	2.69
(1,114)	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	4	2.68
(1,113)	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	3	2.68
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	15	2.68
(1,57)	1:21:A:THR:C	1:22:A:HIS:N	1:22:A:HIS:CA	1:22:A:HIS:C	9	2.68
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	6	2.67
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	4	2.67
(1,229)	1:84:A:GLY:C	1:85:A:LYS:N	1:85:A:LYS:CA	1:85:A:LYS:C	5	2.65
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	2	2.64
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	13	2.64
(1,173)	1:60:B:ARG:C	1:61:B:ASP:N	1:61:B:ASP:CA	1:61:B:ASP:C	11	2.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1	2.59
(1,54)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:THR:N	1:21:A:THR:CA	1:21:A:THR:C	12	2.58
(1,103)	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	4	2.57
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	12	2.57
(1,80)	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	15	2.54
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	2	2.51
(1,153)	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	10	2.5
(1,9)	1:8:A:ALA:C	1:9:A:GLN:N	1:9:A:GLN:CA	1:9:A:GLN:C	3	2.5
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	10	2.49
(1,156)	1:55:B:THR:N	1:55:B:THR:CA	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	15	2.49
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	11	2.49
(1,37)	1:15:B:THR:C	1:16:B:ASP:N	1:16:B:ASP:CA	1:16:B:ASP:C	14	2.49
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	10	2.49
(1,112)	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	13	2.48
(1,241)	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	2	2.47
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	7	2.45
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	4	2.45
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	6	2.45
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	7	2.43
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	3	2.4
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	1	2.39
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	14	2.38
(1,61)	1:22:A:HIS:C	1:23:A:ALA:N	1:23:A:ALA:CA	1:23:A:ALA:C	11	2.38
(1,14)	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	15	2.38
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	6	2.37
(1,24)	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	1:13:B:LYS:N	7	2.37
(1,230)	1:84:B:GLY:C	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	1	2.36
(1,217)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:LYS:N	1:80:A:LYS:CA	1:80:A:LYS:C	5	2.36
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	14	2.36
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	2	2.34
(1,129)	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	1:40:B:ALA:CA	1:40:B:ALA:C	14	2.31
(1,182)	1:63:A:ARG:C	1:64:A:ASN:N	1:64:A:ASN:CA	1:64:A:ASN:C	1	2.3
(1,146)	1:52:A:PHE:C	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	6	2.3
(1,105)	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	10	2.3
(1,232)	1:85:B:LYS:N	1:85:B:LYS:CA	1:85:B:LYS:C	1:86:B:GLN:N	13	2.29
(1,172)	1:59:B:ALA:N	1:59:B:ALA:CA	1:59:B:ALA:C	1:60:B:ARG:N	5	2.29
(1,102)	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	12	2.29
(1,211)	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1:79:A:ALA:N	12	2.28
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	6	2.25
(1,77)	1:26:A:ILE:C	1:27:A:THR:N	1:27:A:THR:CA	1:27:A:THR:C	11	2.24
(1,159)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:ARG:N	9	2.23
(1,243)	1:90:A:ASP:N	1:90:A:ASP:CA	1:90:A:ASP:C	1:91:A:LEU:N	8	2.21
(1,203)	1:75:A:ALA:N	1:75:A:ALA:CA	1:75:A:ALA:C	1:76:A:SER:N	15	2.21
(1,90)	1:29:A:PHE:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	15	2.21
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	14	2.21
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	3	2.19
(1,152)	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	8	2.17
(1,95)	1:31:B:PHE:N	1:31:B:PHE:CA	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	11	2.17
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	8	2.17
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	5	2.16
(1,14)	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	4	2.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	2	2.14
(1,3)	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	1:8:A:ALA:N	13	2.13
(1,198)	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	7	2.12
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	12	2.12
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	12	2.12
(1,222)	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	1:81:B:PHE:CA	1:81:B:PHE:C	12	2.1
(1,187)	1:68:A:GLY:N	1:68:A:GLY:CA	1:68:A:GLY:C	1:69:A:GLU:N	13	2.1
(1,111)	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	10	2.1
(1,106)	1:33:B:HIS:C	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	7	2.1
(1,148)	1:53:A:ALA:N	1:53:A:ALA:CA	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1	2.06
(1,7)	1:8:B:ALA:N	1:8:B:ALA:CA	1:8:B:ALA:C	1:9:B:GLN:N	2	2.06
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	12	2.05
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	13	2.05
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	6	2.04
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	7	2.04
(1,195)	1:73:B:ILE:N	1:73:B:ILE:CA	1:73:B:ILE:C	1:74:B:PRO:N	5	2.03
(1,116)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	14	2.03
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	11	2.02
(1,81)	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	1:28:B:ASN:CA	1:28:B:ASN:C	5	2.01
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	2	2.01
(1,44)	1:17:B:VAL:N	1:17:B:VAL:CA	1:17:B:VAL:C	1:18:B:LEU:N	8	2.0
(1,96)	1:31:A:PHE:N	1:31:A:PHE:CA	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	4	1.99
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	1	1.98
(1,247)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:ASN:N	3	1.97
(1,141)	1:51:A:LYS:C	1:52:A:PHE:N	1:52:A:PHE:CA	1:52:A:PHE:C	1	1.97
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	12	1.97
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	3	1.94
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	14	1.93
(1,4)	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	1:8:B:ALA:N	5	1.92
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	7	1.91
(1,1)	1:6:A:LEU:C	1:7:A:ALA:N	1:7:A:ALA:CA	1:7:A:ALA:C	5	1.91
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	8	1.9
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	6	1.85
(1,124)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	10	1.85
(1,66)	1:23:B:ALA:C	1:24:B:GLU:N	1:24:B:GLU:CA	1:24:B:GLU:C	4	1.85
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	12	1.84
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	14	1.84
(1,117)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:ALA:N	1:37:B:ALA:CA	1:37:B:ALA:C	14	1.84
(1,114)	1:35:B:LYS:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	15	1.84
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	13	1.83
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	2	1.81
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	8	1.81
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	13	1.79
(1,209)	1:77:A:LYS:C	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	8	1.78
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	9	1.77
(1,110)	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	3	1.74
(1,86)	1:28:B:ASN:C	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	4	1.74
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	11	1.72
(1,98)	1:31:A:PHE:C	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	15	1.71
(1,71)	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	14	1.71
(1,248)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:ASN:N	10	1.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,225)	1:81:B:PHE:C	1:82:B:LYS:N	1:82:B:LYS:CA	1:82:B:LYS:C	6	1.69
(1,198)	1:73:A:ILE:C	1:74:A:PRO:N	1:74:A:PRO:CA	1:74:A:PRO:C	11	1.68
(1,33)	1:14:A:PHE:C	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	15	1.68
(1,80)	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	4	1.66
(1,128)	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	1:40:A:ALA:N	13	1.65
(1,81)	1:27:B:THR:C	1:28:B:ASN:N	1:28:B:ASN:CA	1:28:B:ASN:C	9	1.64
(1,158)	1:55:B:THR:C	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	14	1.63
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	9	1.63
(1,70)	1:24:B:GLU:C	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	12	1.62
(1,238)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	13	1.59
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	8	1.58
(1,88)	1:29:B:PHE:N	1:29:B:PHE:CA	1:29:B:PHE:C	1:30:B:VAL:N	7	1.58
(1,125)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	2	1.57
(1,122)	1:37:B:ALA:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	15	1.57
(1,101)	1:32:B:ASP:C	1:33:B:HIS:N	1:33:B:HIS:CA	1:33:B:HIS:C	2	1.57
(1,108)	1:34:B:ILE:N	1:34:B:ILE:CA	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	10	1.55
(1,162)	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	1:57:B:ARG:CA	1:57:B:ARG:C	5	1.53
(1,18)	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1:11:B:ALA:CA	1:11:B:ALA:C	9	1.53
(1,123)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	3	1.5
(1,209)	1:77:A:LYS:C	1:78:A:SER:N	1:78:A:SER:CA	1:78:A:SER:C	1	1.49
(1,109)	1:34:B:ILE:C	1:35:B:LYS:N	1:35:B:LYS:CA	1:35:B:LYS:C	3	1.49
(1,228)	1:82:A:LYS:N	1:82:A:LYS:CA	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ALA:N	4	1.47
(1,188)	1:68:B:GLY:N	1:68:B:GLY:CA	1:68:B:GLY:C	1:69:B:GLU:N	3	1.46
(1,179)	1:62:B:GLY:N	1:62:B:GLY:CA	1:62:B:GLY:C	1:63:B:ARG:N	1	1.46
(1,38)	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1:16:A:ASP:CA	1:16:A:ASP:C	14	1.46
(1,53)	1:20:B:LYS:C	1:21:B:THR:N	1:21:B:THR:CA	1:21:B:THR:C	15	1.45
(1,157)	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	15	1.41
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	11	1.41
(1,150)	1:53:A:ALA:C	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	7	1.39
(1,71)	1:25:A:GLU:N	1:25:A:GLU:CA	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	13	1.39
(1,155)	1:55:A:THR:N	1:55:A:THR:CA	1:55:A:THR:C	1:56:A:GLU:N	14	1.38
(1,239)	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	1:90:B:ASP:N	6	1.35
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	7	1.35
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	8	1.35
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	10	1.35
(1,12)	1:9:B:GLN:N	1:9:B:GLN:CA	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	14	1.35
(1,112)	1:35:A:LYS:N	1:35:A:LYS:CA	1:35:A:LYS:C	1:36:A:LYS:N	11	1.34
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	10	1.34
(1,115)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:ALA:N	6	1.32
(1,237)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:THR:N	1:89:B:THR:CA	1:89:B:THR:C	4	1.29
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	14	1.29
(1,76)	1:26:B:ILE:N	1:26:B:ILE:CA	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	7	1.29
(1,208)	1:76:A:SER:N	1:76:A:SER:CA	1:76:A:SER:C	1:77:A:LYS:N	6	1.28
(1,104)	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	5	1.27
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	4	1.26
(1,85)	1:28:A:ASN:C	1:29:A:PHE:N	1:29:A:PHE:CA	1:29:A:PHE:C	7	1.26
(1,147)	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	2	1.25
(1,100)	1:32:A:ASP:N	1:32:A:ASP:CA	1:32:A:ASP:C	1:33:A:HIS:N	10	1.22
(1,223)	1:81:A:PHE:N	1:81:A:PHE:CA	1:81:A:PHE:C	1:82:A:LYS:N	11	1.21
(1,35)	1:15:A:THR:N	1:15:A:THR:CA	1:15:A:THR:C	1:16:A:ASP:N	1	1.21
(1,16)	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	1:11:B:ALA:N	1	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,14)	1:9:B:GLN:C	1:10:B:ILE:N	1:10:B:ILE:CA	1:10:B:ILE:C	6	1.18
(1,220)	1:80:B:LYS:N	1:80:B:LYS:CA	1:80:B:LYS:C	1:81:B:PHE:N	14	1.16
(1,123)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	7	1.16
(1,180)	1:62:A:GLY:N	1:62:A:GLY:CA	1:62:A:GLY:C	1:63:A:ARG:N	14	1.14
(1,17)	1:10:A:ILE:C	1:11:A:ALA:N	1:11:A:ALA:CA	1:11:A:ALA:C	11	1.14
(1,152)	1:54:A:VAL:N	1:54:A:VAL:CA	1:54:A:VAL:C	1:55:A:THR:N	1	1.11
(1,72)	1:25:B:GLU:N	1:25:B:GLU:CA	1:25:B:GLU:C	1:26:B:ILE:N	4	1.11
(1,65)	1:23:A:ALA:C	1:24:A:GLU:N	1:24:A:GLU:CA	1:24:A:GLU:C	1	1.11
(1,22)	1:11:B:ALA:C	1:12:B:GLU:N	1:12:B:GLU:CA	1:12:B:GLU:C	12	1.11
(1,210)	1:77:B:LYS:C	1:78:B:SER:N	1:78:B:SER:CA	1:78:B:SER:C	5	1.1
(1,160)	1:56:B:GLU:N	1:56:B:GLU:CA	1:56:B:GLU:C	1:57:B:ARG:N	14	1.1
(1,127)	1:39:B:VAL:N	1:39:B:VAL:CA	1:39:B:VAL:C	1:40:B:ALA:N	6	1.1
(1,126)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:VAL:N	1:39:A:VAL:CA	1:39:A:VAL:C	2	1.1
(1,78)	1:26:B:ILE:C	1:27:B:THR:N	1:27:B:THR:CA	1:27:B:THR:C	1	1.09
(1,2)	1:6:B:LEU:C	1:7:B:ALA:N	1:7:B:ALA:CA	1:7:B:ALA:C	9	1.09
(1,183)	1:64:B:ASN:N	1:64:B:ASN:CA	1:64:B:ASN:C	1:65:B:PRO:N	9	1.06
(1,240)	1:89:A:THR:N	1:89:A:THR:CA	1:89:A:THR:C	1:90:A:ASP:N	11	1.05
(1,97)	1:31:B:PHE:C	1:32:B:ASP:N	1:32:B:ASP:CA	1:32:B:ASP:C	2	1.04
(1,73)	1:25:A:GLU:C	1:26:A:ILE:N	1:26:A:ILE:CA	1:26:A:ILE:C	2	1.04
(1,107)	1:34:A:ILE:N	1:34:A:ILE:CA	1:34:A:ILE:C	1:35:A:LYS:N	4	1.03
(1,147)	1:53:B:ALA:N	1:53:B:ALA:CA	1:53:B:ALA:C	1:54:B:VAL:N	3	1.02
(1,202)	1:74:B:PRO:C	1:75:B:ALA:N	1:75:B:ALA:CA	1:75:B:ALA:C	1	1.01
(1,104)	1:33:A:HIS:N	1:33:A:HIS:CA	1:33:A:HIS:C	1:34:A:ILE:N	1	1.01
(1,216)	1:79:B:ALA:N	1:79:B:ALA:CA	1:79:B:ALA:C	1:80:B:LYS:N	3	1.0