



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 07:22 AM UTC

PDB ID : 2N4B / pdb\_00002n4b  
BMRB ID : 17611  
Title : EC-NMR Structure of *Ralstonia metallidurans* Rmet\_5065 Determined by Combining Evolutionary Couplings (EC) and Sparse NMR Data. Northeast Structural Genomics Consortium target CrR115  
Authors : Tang, Y.; Huang, Y.J.; Hopf, T.A.; Sander, C.; Marks, D.; Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)  
Deposited on : 2015-06-17

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0  
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)  
wwPDB-RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
wwPDB-ShiftChecker : v1.2  
BMRB Restraints Analysis : v1.2  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

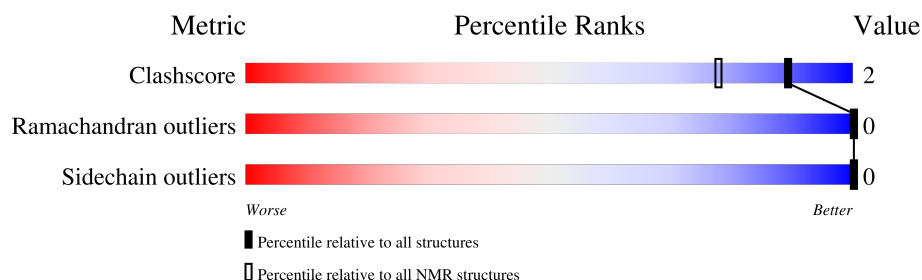
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 95%.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1   | A     | 142    |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 16 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:26, A:40-A:54, A:66-A:134 (110) | 0.79              | 16           |

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2136 atoms, of which 1037 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Uncharacterized protein.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |     |      |     |     |   | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|---|-------|
| 1   | A     | 138      | Total | C   | H    | N   | O   | S | 0     |
|     |       |          | 2136  | 691 | 1037 | 192 | 213 | 3 |       |

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

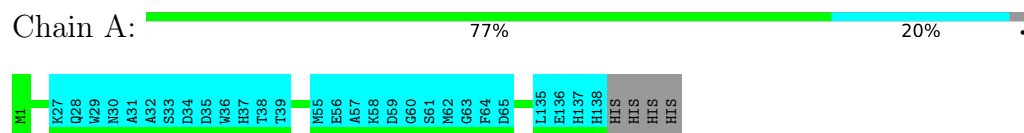
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment        | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A     | 135     | LEU      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |
| A     | 136     | GLU      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |
| A     | 137     | HIS      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |
| A     | 138     | HIS      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |
| A     | 139     | HIS      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |
| A     | 140     | HIS      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |
| A     | 141     | HIS      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |
| A     | 142     | HIS      | -      | expression tag | UNP Q1LD49 |

## 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: Uncharacterized protein

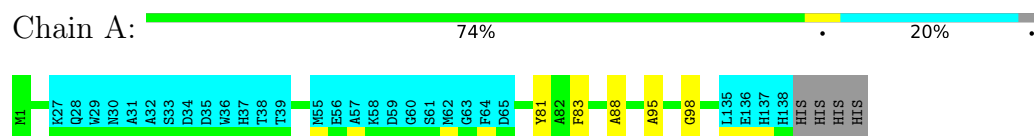


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

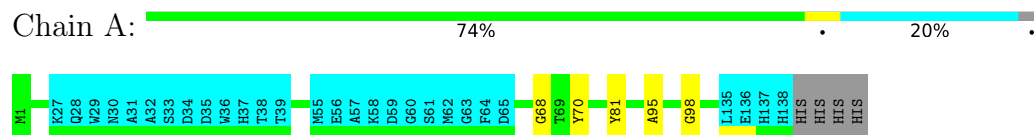
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Uncharacterized protein



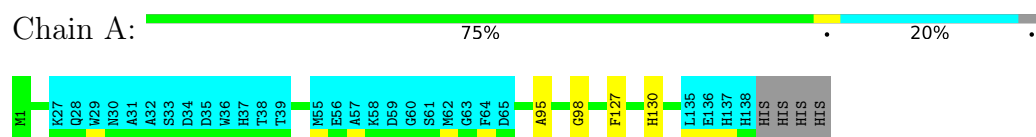
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Uncharacterized protein



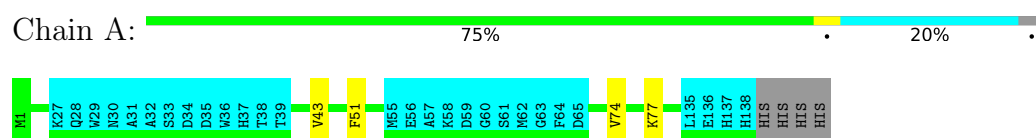
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Uncharacterized protein



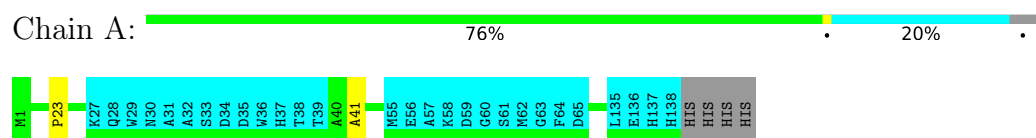
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Uncharacterized protein



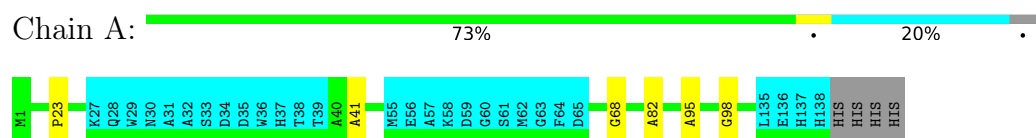
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Uncharacterized protein



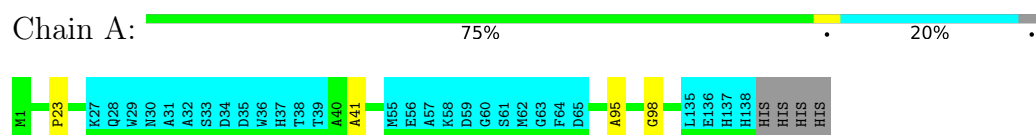
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Uncharacterized protein



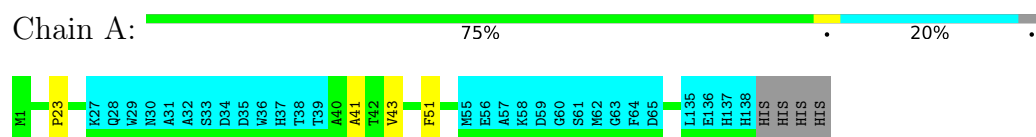
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Uncharacterized protein



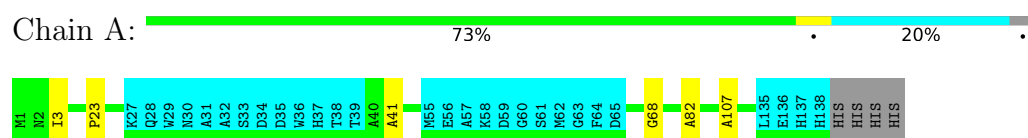
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Uncharacterized protein



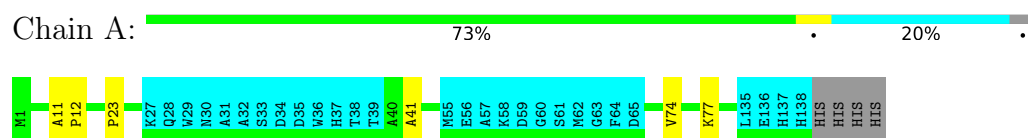
### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Uncharacterized protein



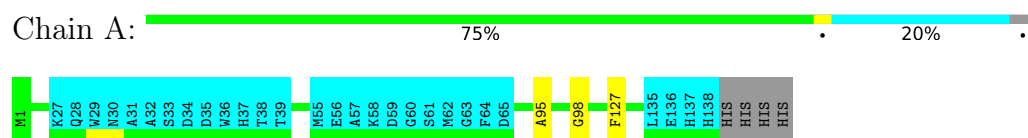
### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Uncharacterized protein



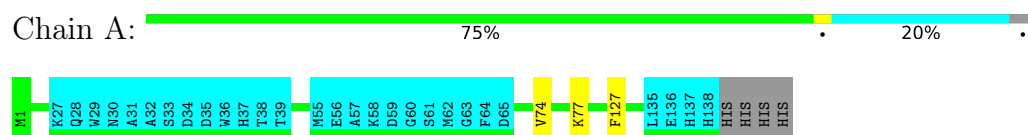
### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Uncharacterized protein



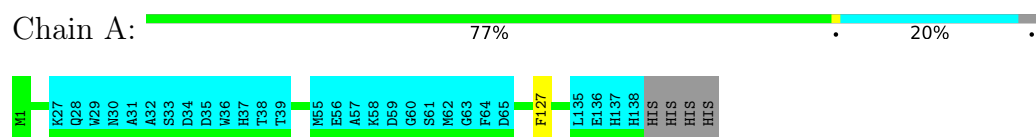
### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Uncharacterized protein



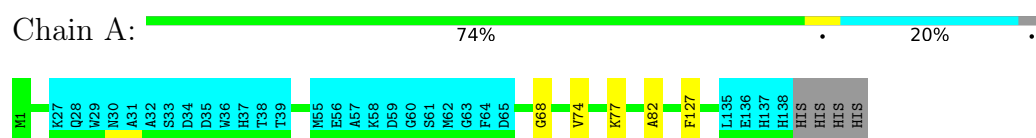
### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Uncharacterized protein



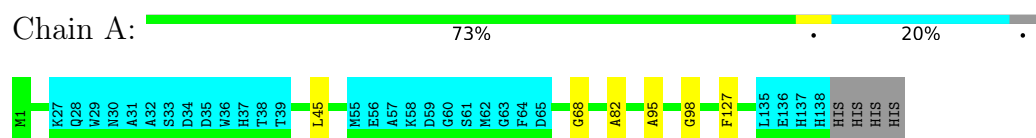
### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Uncharacterized protein



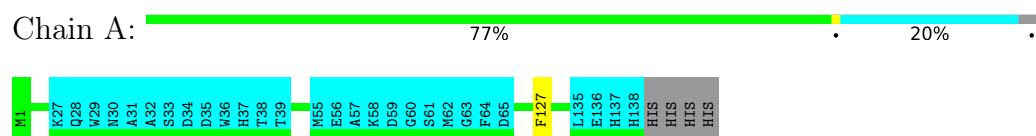
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Uncharacterized protein



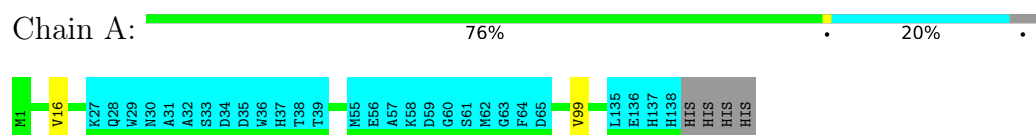
### 4.2.16 Score per residue for model 16 (medoid)

- Molecule 1: Uncharacterized protein



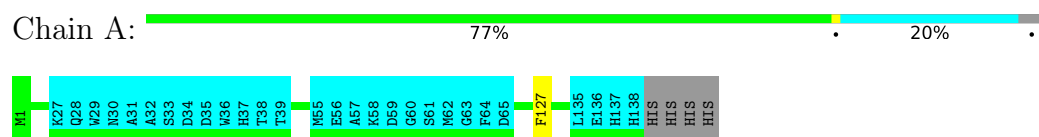
### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Uncharacterized protein



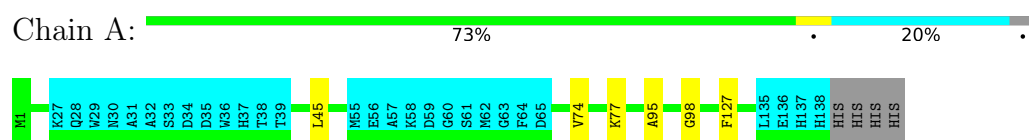
### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Uncharacterized protein



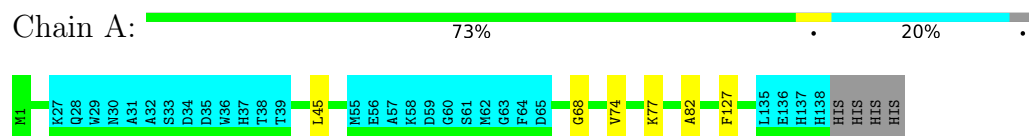
### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Uncharacterized protein



### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Uncharacterized protein



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|----------------|---------|
| Rosetta       | refinement     |         |
| Reduce        | 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                       | 1741           |
| Number of shifts mapped to atoms             | 1741           |
| Number of unparsed shifts                    | 0              |
| Number of shifts with mapping errors         | 0              |
| Number of shifts with mapping warnings       | 0              |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 95%            |

## 6 Model quality [i](#)

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

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts [i](#)

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1   | A     | 872   | 848      | 850      | 3±1     |
| All | All   | 17440 | 16960    | 17000    | 63      |

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 2.

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

| Atom-1          | Atom-2          | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
|                 |                 |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:83:PHE:O    | 1:A:83:PHE:CD1  | 0.66     | 2.49        | 1      | 1     |
| 1:A:68:GLY:HA3  | 1:A:82:ALA:O    | 0.61     | 1.95        | 14     | 5     |
| 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:99:VAL:HG11 | 0.59     | 1.74        | 17     | 1     |
| 1:A:23:PRO:HB3  | 1:A:41:ALA:HB3  | 0.55     | 1.78        | 7      | 6     |
| 1:A:127:PHE:O   | 1:A:127:PHE:CD1 | 0.55     | 2.59        | 13     | 3     |
| 1:A:127:PHE:CD1 | 1:A:127:PHE:C   | 0.54     | 2.86        | 13     | 3     |
| 1:A:127:PHE:C   | 1:A:127:PHE:CD1 | 0.53     | 2.87        | 19     | 6     |
| 1:A:127:PHE:CD1 | 1:A:127:PHE:O   | 0.52     | 2.63        | 19     | 6     |
| 1:A:43:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3  | 0.50     | 1.84        | 8      | 2     |
| 1:A:74:VAL:O    | 1:A:77:LYS:N    | 0.50     | 2.44        | 12     | 6     |
| 1:A:127:PHE:O   | 1:A:127:PHE:HD1 | 0.50     | 1.90        | 13     | 6     |
| 1:A:11:ALA:HB1  | 1:A:12:PRO:HD2  | 0.49     | 1.84        | 10     | 1     |
| 1:A:95:ALA:HB3  | 1:A:98:GLY:O    | 0.48     | 2.09        | 2      | 8     |
| 1:A:127:PHE:O   | 1:A:130:HIS:HB3 | 0.46     | 2.10        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1         | Atom-2          | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
|                |                 |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:45:LEU:N   | 1:A:45:LEU:HD12 | 0.44     | 2.28        | 20     | 3     |
| 1:A:70:TYR:N   | 1:A:70:TYR:CD1  | 0.44     | 2.86        | 2      | 1     |
| 1:A:83:PHE:O   | 1:A:83:PHE:CG   | 0.42     | 2.72        | 1      | 1     |
| 1:A:81:TYR:CZ  | 1:A:88:ALA:HB3  | 0.42     | 2.49        | 1      | 1     |
| 1:A:3:ILE:HG12 | 1:A:107:ALA:HB2 | 0.42     | 1.91        | 9      | 1     |
| 1:A:68:GLY:HA3 | 1:A:81:TYR:HB2  | 0.41     | 1.92        | 2      | 1     |

## 6.3 Torsion angles [i](#)

### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed        | Favoured      | Allowed    | Outliers   | Percentiles |     |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|------------|-------------|-----|
| 1   | A     | 109/142 (77%)   | 107±1 (98±1%) | 2±1 (2±1%) | 0±0 (0±0%) | 100         | 100 |
| All | All   | 2180/2840 (77%) | 2147 (98%)    | 33 (2%)    | 0 (0%)     | 100         | 100 |

There are no Ramachandran outliers.

### 6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed        | Rotameric     | Outliers   | Percentiles |     |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|-------------|-----|
| 1   | A     | 91/118 (77%)    | 91±0 (100±0%) | 0±0 (0±0%) | 100         | 100 |
| All | All   | 1820/2360 (77%) | 1820 (100%)   | 0 (0%)     | 100         | 100 |

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

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 95% for the well-defined parts and 94% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

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

#### 7.1.1 Bookkeeping

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

|                                         |      |
|-----------------------------------------|------|
| Total number of shifts                  | 1741 |
| Number of shifts mapped to atoms        | 1741 |
| Number of unparsed shifts               | 0    |
| Number of shifts with mapping errors    | 0    |
| Number of shifts with mapping warnings  | 0    |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 8    |

#### 7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus                | # values | Correction $\pm$ precision, ppm | Suggested action           |
|------------------------|----------|---------------------------------|----------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 137      | $-0.36 \pm 0.09$                | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$  | 128      | $0.06 \pm 0.12$                 | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}'$       | 133      | $0.21 \pm 0.12$                 | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{15}\text{N}$        | 133      | $-0.52 \pm 0.21$                | Should be applied          |

#### 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 95%, i.e. 1417 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1496. 0 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total         | $^1\text{H}$   | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 543/549 (99%) | 222/223 (100%) | 216/220 (98%)   | 105/106 (99%)   |
| Sidechain | 751/813 (92%) | 499/527 (95%)  | 235/250 (94%)   | 17/36 (47%)     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

|          | <b>Total</b>    | <b><sup>1</sup>H</b> | <b><sup>13</sup>C</b> | <b><sup>15</sup>N</b> |
|----------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Aromatic | 123/134 (92%)   | 61/66 (92%)          | 58/64 (91%)           | 4/4 (100%)            |
| Overall  | 1417/1496 (95%) | 782/816 (96%)        | 509/534 (95%)         | 126/146 (86%)         |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 94%, i.e. 1738 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1845. 0 out of 18 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | <b>Total</b>    | <b><sup>1</sup>H</b> | <b><sup>13</sup>C</b> | <b><sup>15</sup>N</b> |
|-----------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Backbone  | 682/691 (99%)   | 279/281 (99%)        | 270/276 (98%)         | 133/134 (99%)         |
| Sidechain | 896/967 (93%)   | 597/625 (96%)        | 280/302 (93%)         | 19/40 (48%)           |
| Aromatic  | 160/187 (86%)   | 79/95 (83%)          | 74/85 (87%)           | 7/7 (100%)            |
| Overall   | 1738/1845 (94%) | 955/1001 (95%)       | 624/663 (94%)         | 159/181 (88%)         |

#### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

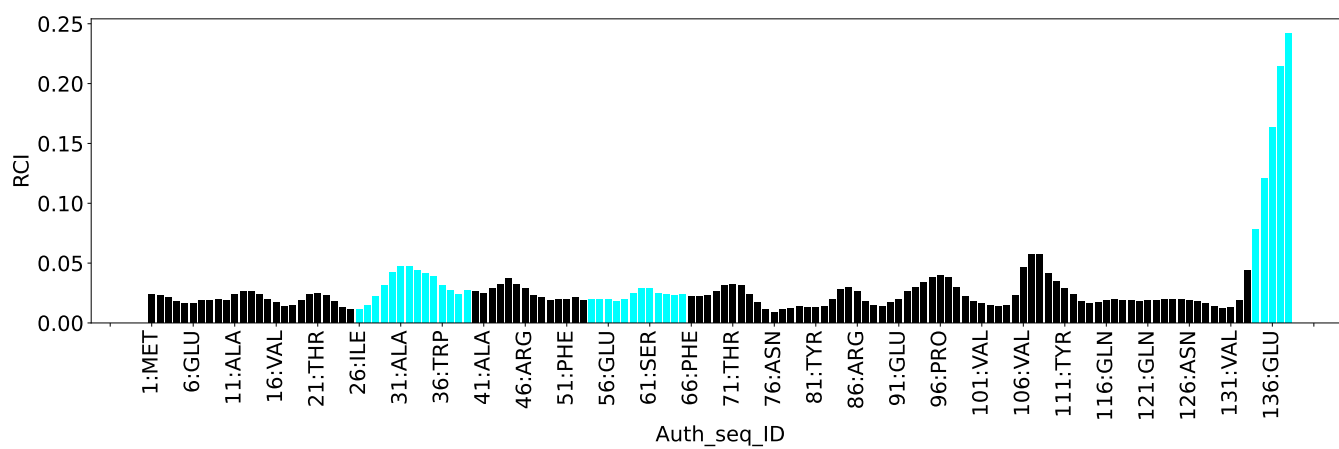
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1       | A     | 22  | THR  | HG1  | 6.39       | 0.08 – 2.19         | 24.9    |
| 1       | A     | 38  | THR  | HG1  | 5.70       | 0.08 – 2.19         | 21.6    |
| 1       | A     | 7   | THR  | HG1  | 5.54       | 0.08 – 2.19         | 20.9    |
| 1       | A     | 86  | ARG  | NE   | 112.80     | 76.53 – 92.65       | 17.5    |
| 1       | A     | 129 | ARG  | NE   | 110.60     | 76.53 – 92.65       | 16.1    |
| 1       | A     | 76  | ASN  | H    | 3.39       | 5.28 – 11.36        | -8.1    |
| 1       | A     | 30  | ASN  | HB3  | 0.75       | 1.12 – 4.38         | -6.1    |
| 1       | A     | 3   | ILE  | HB   | 0.23       | 0.35 – 3.22         | -5.4    |

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



## 8 NMR restraints analysis [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                                | 172   |
| Intra-residue ( $ i-j =0$ )                              | 3     |
| Sequential ( $ i-j =1$ )                                 | 93    |
| Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )                 | 27    |
| Long range ( $ i-j \geq 5$ )                             | 49    |
| Inter-chain                                              | 0     |
| Hydrogen bond restraints                                 | 0     |
| Disulfide bond restraints                                | 0     |
| Total dihedral-angle restraints                          | 242   |
| Number of unmapped restraints                            | 0     |
| Number of restraints per residue                         | 2.9   |
| Number of long range restraints per residue <sup>1</sup> | 0.3   |

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

### 8.2 Residual restraint violations [i](#)

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

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

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

#### 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) | 4.2                                    | 9.8     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Bins (°)           | Average number of violations per model | Max (°) |
|--------------------|----------------------------------------|---------|
| 10.0-20.0 (Medium) | 4.7                                    | 19.88   |
| >20.0 (Large)      | 232.4                                  | 178.94  |

## 9 Distance violation analysis ⓘ

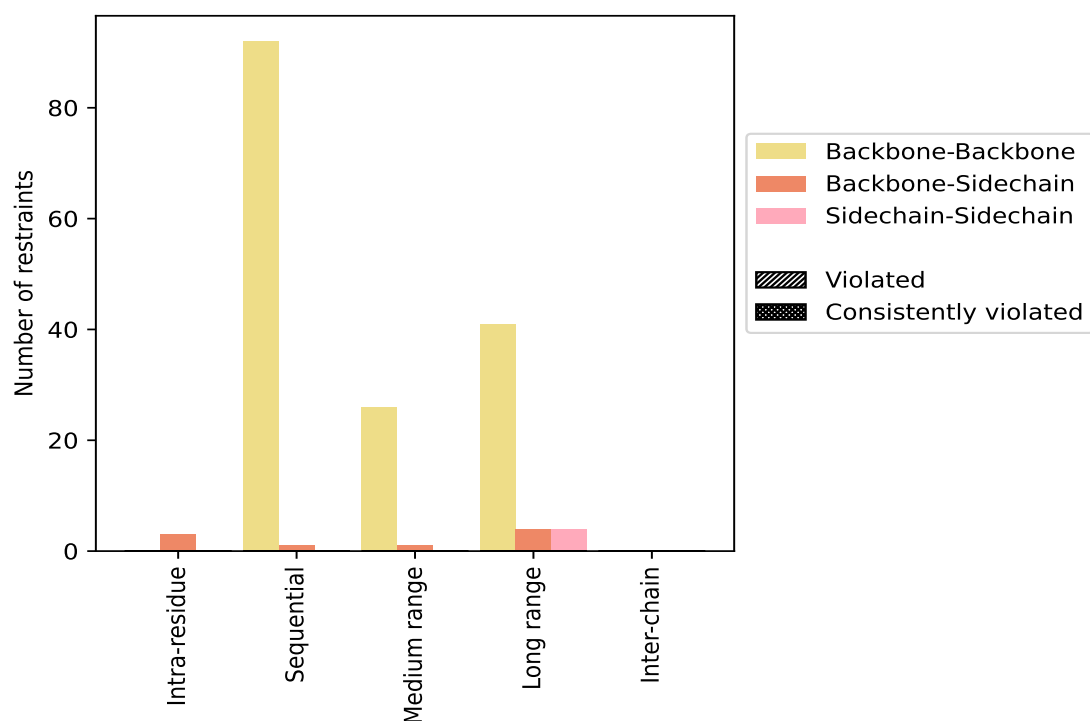
### 9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

| Restrains type                         | Count | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|----------------------------------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|                                        |       |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| Intra-residue ( $ i-j =0$ )            | 3     | 1.7            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Backbone                      | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                     | 3     | 1.7            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                    | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sequential ( $ i-j =1$ )               | 93    | 54.1           | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Backbone                      | 92    | 53.5           | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                     | 1     | 0.6            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                    | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Medium range ( $ i-j >1$ & $ i-j <5$ ) | 27    | 15.7           | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Backbone                      | 26    | 15.1           | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                     | 1     | 0.6            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                    | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Long range ( $ i-j \geq 5$ )           | 49    | 28.5           | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Backbone                      | 41    | 23.8           | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                     | 4     | 2.3            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                    | 4     | 2.3            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Inter-chain                            | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Backbone                      | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                     | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                    | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Hydrogen bond                          | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Disulfide bond                         | 0     | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Total                                  | 172   | 100.0          | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Backbone                      | 159   | 92.4           | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                     | 9     | 5.2            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                    | 4     | 2.3            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |

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

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



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

## 9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

No violations found

## 9.3 Distance violation statistics for the ensemble [i](#)

No violations found

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

No violations found

## 9.5 All violated distance restraints [i](#)

No violations found

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

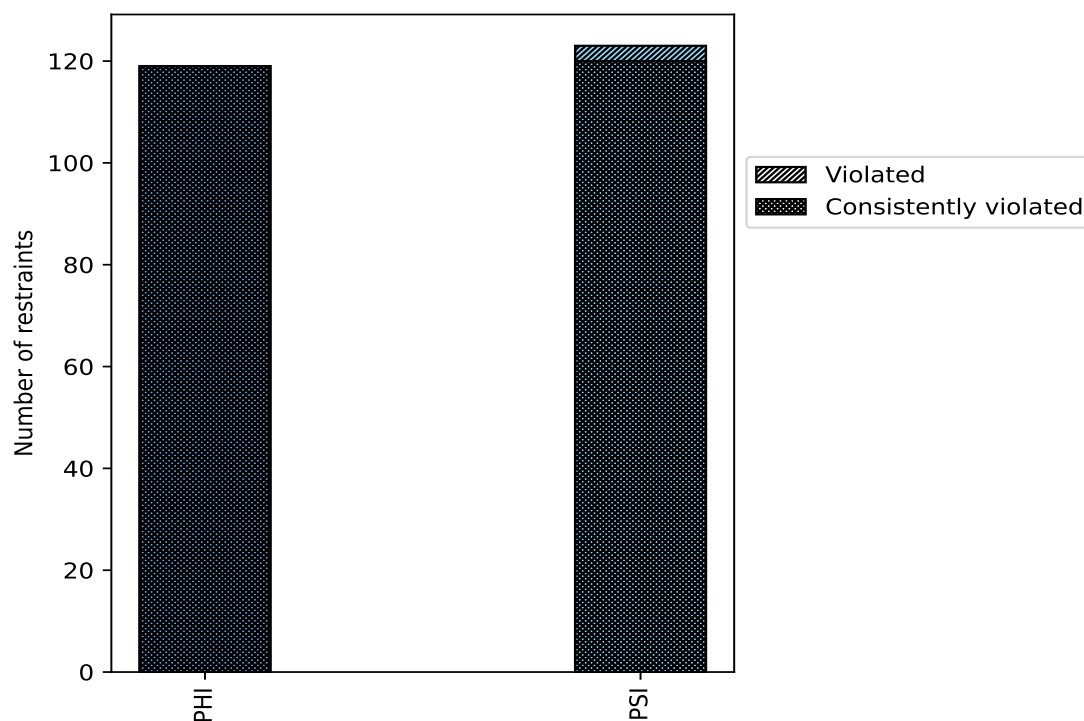
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

| Angle type | Count | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|            |       |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| PHI        | 119   | 49.2           | 119                   | 100.0          | 49.2           | 119                                | 100.0          | 49.2           |
| PSI        | 123   | 50.8           | 123                   | 100.0          | 50.8           | 120                                | 97.6           | 49.6           |
| Total      | 242   | 100.0          | 242                   | 100.0          | 100.0          | 239                                | 98.8           | 98.8           |

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

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



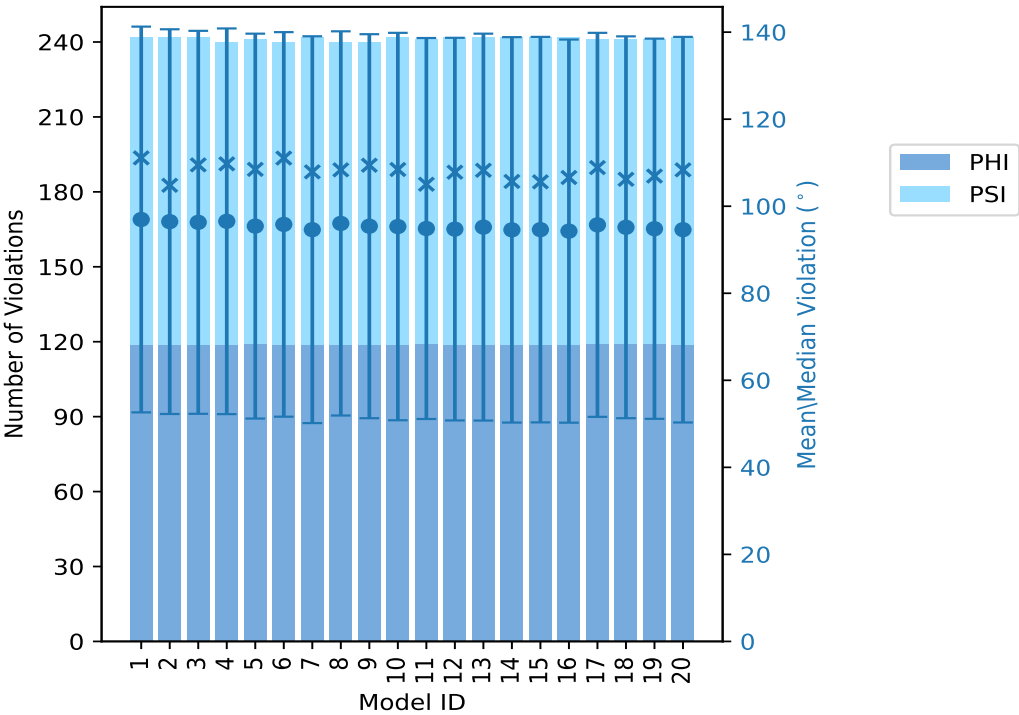
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

## 10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

| Model ID | Number of violations |     |       | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
|          | PHI                  | PSI | Total |          |         |        |            |
| 1        | 119                  | 123 | 242   | 96.95    | 174.08  | 44.32  | 111.11     |
| 2        | 119                  | 123 | 242   | 96.46    | 178.94  | 44.2   | 104.81     |
| 3        | 119                  | 123 | 242   | 96.3     | 175.6   | 44.0   | 109.5      |
| 4        | 119                  | 121 | 240   | 96.54    | 178.56  | 44.31  | 109.74     |
| 5        | 119                  | 122 | 241   | 95.43    | 178.6   | 44.22  | 108.47     |
| 6        | 119                  | 121 | 240   | 95.82    | 174.19  | 44.18  | 111.06     |
| 7        | 119                  | 123 | 242   | 94.61    | 176.69  | 44.44  | 107.9      |
| 8        | 119                  | 121 | 240   | 96.05    | 178.13  | 44.14  | 108.36     |
| 9        | 119                  | 121 | 240   | 95.41    | 177.1   | 44.12  | 109.42     |
| 10       | 119                  | 123 | 242   | 95.33    | 178.71  | 44.51  | 108.44     |
| 11       | 119                  | 122 | 241   | 94.88    | 172.85  | 43.77  | 105.05     |
| 12       | 119                  | 123 | 242   | 94.74    | 175.19  | 43.96  | 107.82     |
| 13       | 119                  | 123 | 242   | 95.2     | 178.43  | 44.45  | 108.26     |
| 14       | 119                  | 123 | 242   | 94.57    | 175.22  | 44.28  | 105.7      |
| 15       | 119                  | 123 | 242   | 94.62    | 171.7   | 44.29  | 105.61     |
| 16       | 119                  | 123 | 242   | 94.28    | 176.6   | 44.02  | 106.6      |
| 17       | 119                  | 122 | 241   | 95.72    | 177.74  | 44.12  | 108.88     |
| 18       | 119                  | 122 | 241   | 95.16    | 175.41  | 43.87  | 106.19     |
| 19       | 119                  | 122 | 241   | 94.83    | 175.4   | 43.68  | 106.93     |
| 20       | 119                  | 123 | 242   | 94.61    | 175.67  | 44.3   | 108.36     |

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



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

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

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

| Number of violated restraints |     |       | Fraction of the ensemble |      |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|------|
| PHI                           | PSI | Total | Count <sup>1</sup>       | %    |
| 0                             | 0   | 0     | 1                        | 5.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 2                        | 10.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 3                        | 15.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 4                        | 20.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 5                        | 25.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 6                        | 30.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 7                        | 35.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 8                        | 40.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 9                        | 45.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 10                       | 50.0 |
| 0                             | 0   | 0     | 11                       | 55.0 |

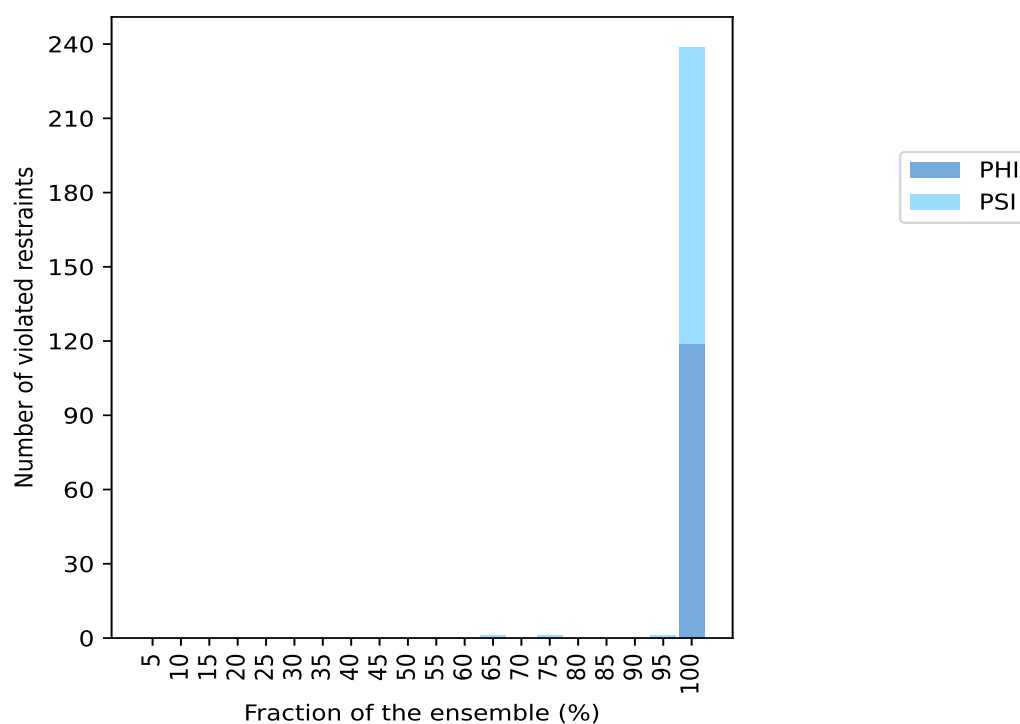
Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Number of violated restraints |     |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PHI                           | PSI | Total | Count <sup>1</sup>       | %     |
| 0                             | 0   | 0     | 12                       | 60.0  |
| 0                             | 1   | 1     | 13                       | 65.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 14                       | 70.0  |
| 0                             | 1   | 1     | 15                       | 75.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 16                       | 80.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 17                       | 85.0  |
| 0                             | 0   | 0     | 18                       | 90.0  |
| 0                             | 1   | 1     | 19                       | 95.0  |
| 119                           | 120 | 239   | 20                       | 100.0 |

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

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

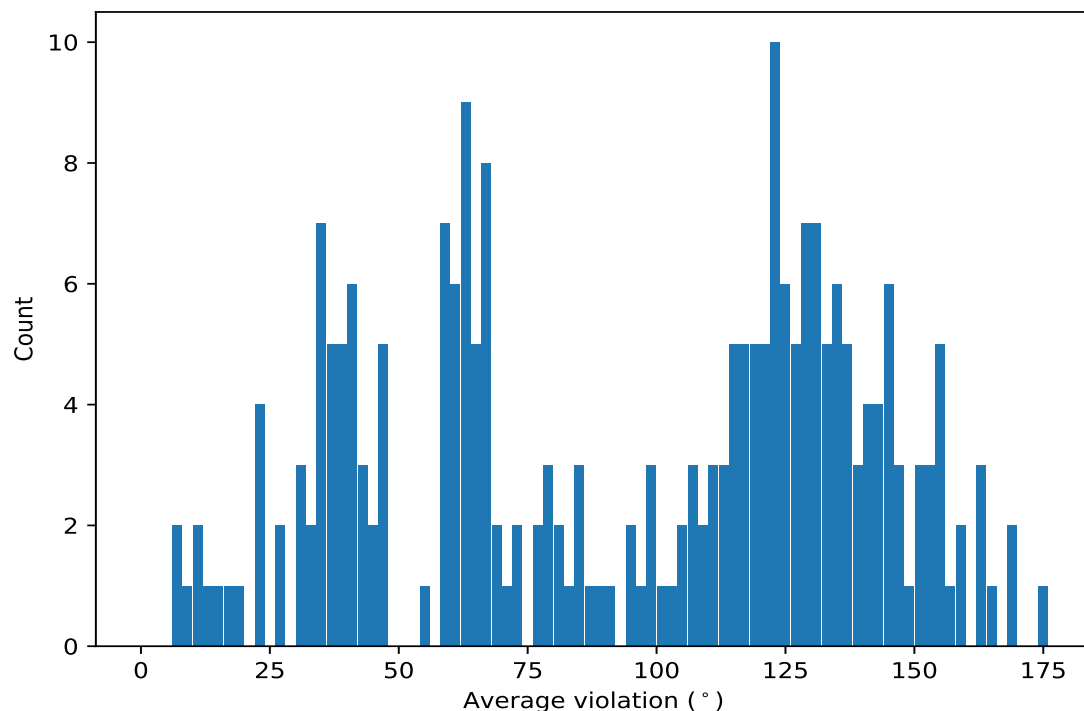


## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble ⓘ

### 10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations ⓘ

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

in the ensemble



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

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

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N   | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 20                  | 175.66 | 2.06            | 175.4  |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA  | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 20                  | 168.39 | 3.22            | 167.1  |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N  | 20                  | 168.25 | 4.5             | 167.46 |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N   | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 20                  | 164.96 | 11.74           | 168.42 |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N  | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N  | 20                  | 163.97 | 3.83            | 163.72 |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C  | 1:46:A:ARG:N   | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C  | 20                  | 163.4  | 3.17            | 163.46 |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 20                  | 162.78 | 7.66            | 161.87 |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 20                  | 159.7  | 6.49            | 158.5  |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 20                  | 158.65 | 2.3             | 158.27 |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 20                  | 156.34 | 3.54            | 156.68 |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 20                  | 155.83 | 5.05            | 155.69 |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 20                  | 155.79 | 1.09            | 155.79 |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 20                  | 155.38 | 9.27            | 158.61 |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 20                  | 155.27 | 2.51            | 155.34 |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 20                  | 154.92 | 1.98            | 155.24 |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 20                  | 153.98 | 4.69            | 156.06 |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 20                  | 152.37 | 5.53            | 149.39 |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 20                  | 152.0  | 3.18            | 152.02 |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 20                  | 151.6  | 5.06            | 151.94 |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 20                  | 150.68 | 6.26            | 152.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C   | 1:50:A:ALA:N  | 20                  | 150.47 | 2.95            | 149.97 |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C   | 1:51:A:PHE:N  | 20                  | 148.36 | 3.36            | 148.01 |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C   | 1:34:A:ASP:N  | 20                  | 147.23 | 6.61            | 149.5  |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C   | 1:89:A:LYS:N  | 20                  | 146.82 | 3.76            | 146.1  |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C   | 1:31:A:ALA:N  | 20                  | 146.68 | 17.52           | 149.28 |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 20                  | 145.74 | 4.06            | 146.22 |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 20                  | 145.73 | 3.65            | 145.33 |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 20                  | 145.73 | 1.78            | 145.4  |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C  | 1:112:A:PRO:N | 20                  | 144.93 | 7.66            | 147.51 |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C   | 1:70:A:TYR:N  | 20                  | 144.77 | 4.11            | 145.93 |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 20                  | 144.68 | 3.57            | 143.78 |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 20                  | 142.92 | 5.11            | 144.89 |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 20                  | 142.71 | 3.72            | 143.18 |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 20                  | 142.65 | 2.81            | 142.82 |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 20                  | 142.04 | 1.9             | 141.88 |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 20                  | 141.8  | 3.65            | 140.89 |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 20                  | 141.77 | 8.48            | 141.3  |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 20                  | 140.65 | 3.07            | 140.76 |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 20                  | 140.32 | 5.84            | 142.06 |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 20                  | 139.77 | 1.7             | 140.06 |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 20                  | 139.33 | 4.52            | 136.76 |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 20                  | 138.21 | 3.81            | 138.77 |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 20                  | 137.64 | 5.74            | 139.28 |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 20                  | 137.55 | 5.33            | 138.26 |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 20                  | 137.49 | 2.55            | 137.62 |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 20                  | 137.08 | 16.58           | 127.34 |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 20                  | 136.53 | 7.03            | 137.23 |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 20                  | 135.86 | 4.68            | 135.57 |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 20                  | 135.82 | 2.88            | 135.81 |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 20                  | 135.64 | 4.24            | 134.34 |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 20                  | 135.1  | 6.75            | 138.42 |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 20                  | 134.69 | 7.81            | 133.15 |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 20                  | 134.12 | 3.25            | 134.72 |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 20                  | 133.99 | 3.64            | 134.7  |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 20                  | 133.22 | 5.29            | 133.43 |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C   | 1:67:A:ALA:N  | 20                  | 132.84 | 3.66            | 133.94 |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 20                  | 132.42 | 4.34            | 131.25 |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C   | 1:56:A:GLU:N  | 20                  | 132.26 | 3.79            | 132.03 |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 20                  | 131.89 | 2.23            | 131.82 |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C   | 1:58:A:LYS:N  | 20                  | 131.84 | 3.31            | 133.06 |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 20                  | 131.77 | 5.87            | 131.91 |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C   | 1:91:A:GLU:N  | 20                  | 131.54 | 3.85            | 132.52 |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C    | 1:5:A:VAL:N   | 20                  | 131.48 | 2.27            | 132.07 |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 20                  | 131.4  | 7.36            | 132.8  |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C  | 1:107:A:ALA:N | 20                  | 130.16 | 2.29            | 130.29 |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 20                  | 129.87 | 4.13            | 129.58 |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 20                  | 129.76 | 9.38            | 126.99 |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 20                  | 129.73 | 4.06            | 130.44 |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 20                  | 128.49 | 1.85            | 128.32 |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 20                  | 128.41 | 2.62            | 128.58 |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 20                  | 128.38 | 3.63            | 127.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C   | 1:44:A:ASP:N  | 20                  | 128.09 | 3.76            | 128.14 |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 20                  | 127.86 | 4.59            | 129.55 |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C    | 1:4:A:THR:N   | 20                  | 127.73 | 1.69            | 127.54 |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C  | 1:105:A:PHE:N | 20                  | 127.7  | 2.44            | 127.65 |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C   | 1:90:A:VAL:N  | 20                  | 127.46 | 1.65            | 127.46 |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 20                  | 126.83 | 2.24            | 126.55 |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C    | 1:3:A:ILE:N   | 20                  | 125.21 | 2.92            | 126.04 |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 20                  | 125.16 | 2.86            | 125.18 |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 20                  | 124.94 | 6.82            | 125.64 |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 20                  | 124.72 | 3.79            | 123.23 |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 20                  | 124.56 | 5.15            | 123.82 |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 20                  | 124.32 | 3.21            | 124.62 |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 20                  | 123.73 | 3.34            | 124.18 |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 20                  | 123.7  | 2.13            | 123.71 |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 20                  | 123.42 | 6.54            | 122.28 |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 20                  | 123.13 | 2.38            | 123.46 |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 20                  | 123.07 | 3.63            | 123.18 |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 20                  | 122.88 | 3.53            | 122.18 |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 20                  | 122.61 | 2.95            | 122.76 |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 20                  | 122.47 | 3.62            | 121.85 |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 20                  | 122.39 | 2.92            | 122.45 |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 20                  | 122.3  | 2.24            | 122.12 |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 20                  | 121.65 | 6.97            | 119.1  |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 20                  | 121.24 | 11.27           | 121.4  |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 20                  | 121.08 | 7.62            | 119.36 |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 20                  | 121.0  | 2.0             | 120.89 |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 20                  | 120.63 | 10.0            | 119.56 |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 20                  | 119.63 | 2.77            | 119.62 |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 20                  | 119.35 | 1.68            | 119.28 |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 20                  | 119.14 | 2.24            | 119.38 |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 20                  | 118.4  | 1.92            | 117.84 |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 20                  | 118.12 | 7.71            | 117.85 |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 20                  | 117.96 | 2.89            | 118.64 |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 20                  | 117.7  | 4.05            | 116.75 |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 20                  | 116.87 | 1.68            | 117.03 |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 20                  | 116.42 | 8.75            | 116.96 |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 20                  | 116.28 | 1.81            | 116.21 |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 20                  | 115.5  | 1.05            | 115.62 |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 20                  | 115.23 | 3.02            | 113.98 |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 20                  | 114.83 | 4.63            | 115.16 |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 20                  | 114.59 | 3.73            | 113.55 |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 20                  | 114.04 | 2.89            | 114.49 |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 20                  | 113.84 | 2.01            | 113.45 |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 20                  | 113.28 | 3.09            | 113.28 |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 20                  | 112.94 | 3.76            | 113.2  |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N   | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 20                  | 111.82 | 6.1             | 109.75 |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N   | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 20                  | 110.62 | 11.3            | 106.97 |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 20                  | 110.51 | 13.02           | 104.46 |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N   | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 20                  | 108.94 | 4.19            | 110.3  |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N  | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 20                  | 108.01 | 2.46            | 108.55 |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 20                  | 107.57 | 38.04           | 109.07 |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 20                  | 107.42 | 4.24            | 109.16 |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 20                  | 106.66 | 2.28            | 106.34 |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 20                  | 105.13 | 4.24            | 105.43 |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 20                  | 105.06 | 7.94            | 107.84 |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 20                  | 103.47 | 2.27            | 103.65 |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 20                  | 101.84 | 8.07            | 105.34 |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 20                  | 99.57  | 5.97            | 100.45 |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 20                  | 99.23  | 6.75            | 96.9   |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 20                  | 98.58  | 2.71            | 98.54  |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 20                  | 97.53  | 1.48            | 97.3   |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 20                  | 95.71  | 3.16            | 96.32  |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 20                  | 94.7   | 7.0             | 92.62  |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 20                  | 91.41  | 5.49            | 89.78  |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 20                  | 89.58  | 14.25           | 85.94  |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 20                  | 87.19  | 1.48            | 87.38  |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 20                  | 85.72  | 10.49           | 82.68  |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 20                  | 85.28  | 10.69           | 83.34  |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 20                  | 84.26  | 3.94            | 85.35  |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 20                  | 82.82  | 4.05            | 81.16  |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 20                  | 80.54  | 4.21            | 81.34  |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 20                  | 80.34  | 2.13            | 80.54  |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 20                  | 79.16  | 3.39            | 78.74  |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 20                  | 79.09  | 5.98            | 80.01  |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 20                  | 78.56  | 2.31            | 77.41  |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 20                  | 77.95  | 6.66            | 75.54  |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 20                  | 76.06  | 13.4            | 71.65  |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 20                  | 72.72  | 2.76            | 72.47  |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 20                  | 72.25  | 2.52            | 71.34  |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 20                  | 71.22  | 2.04            | 71.43  |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 20                  | 69.96  | 4.3             | 69.14  |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 20                  | 69.01  | 3.51            | 67.97  |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 20                  | 67.75  | 4.0             | 69.17  |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 20                  | 67.65  | 2.0             | 68.14  |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 20                  | 67.2   | 3.22            | 66.48  |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 20                  | 66.92  | 37.04           | 59.56  |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 20                  | 66.57  | 1.92            | 67.12  |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 20                  | 66.39  | 2.01            | 66.03  |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 20                  | 66.22  | 4.87            | 63.66  |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 20                  | 66.13  | 1.62            | 66.06  |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 20                  | 65.65  | 3.5             | 64.39  |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 20                  | 65.24  | 1.68            | 65.16  |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 20                  | 65.19  | 3.03            | 64.62  |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 20                  | 64.78  | 1.36            | 64.54  |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 20                  | 64.28  | 1.22            | 64.16  |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 20                  | 63.82  | 4.64            | 60.66  |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 20                  | 63.29  | 8.17            | 61.61  |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 20                  | 63.21  | 0.85            | 63.42  |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 20                  | 63.09  | 4.24            | 60.81  |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 20                  | 62.79  | 3.91            | 64.26  |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 20                  | 62.77  | 1.65            | 63.4   |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 20                  | 62.62  | 2.19            | 62.69  |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N  | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 20                  | 62.1  | 2.05            | 62.68  |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N  | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 20                  | 62.1  | 3.57            | 62.49  |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N   | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 20                  | 61.88 | 1.87            | 62.23  |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N  | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 20                  | 61.79 | 0.95            | 61.75  |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N   | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 20                  | 61.76 | 1.79            | 61.96  |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N  | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 20                  | 61.58 | 1.19            | 61.7   |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N   | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 20                  | 61.55 | 2.22            | 61.44  |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N   | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 20                  | 60.23 | 2.59            | 59.84  |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N  | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 20                  | 59.82 | 2.26            | 60.56  |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N   | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 20                  | 58.81 | 3.61            | 59.32  |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N  | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 20                  | 58.45 | 1.49            | 58.79  |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N  | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 20                  | 58.33 | 1.39            | 58.4   |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 20                  | 58.31 | 6.59            | 58.8   |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N  | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 20                  | 58.31 | 3.68            | 60.44  |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N   | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 20                  | 58.22 | 2.37            | 58.04  |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 20                  | 54.92 | 1.59            | 55.52  |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C  | 1:118:A:GLN:N | 20                  | 47.57 | 2.07            | 48.14  |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 20                  | 46.51 | 1.14            | 46.38  |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C  | 1:131:A:VAL:N | 20                  | 46.42 | 4.72            | 45.39  |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C  | 1:129:A:ARG:N | 20                  | 46.21 | 3.63            | 45.36  |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 20                  | 46.15 | 6.27            | 48.29  |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C  | 1:120:A:TRP:N | 20                  | 45.31 | 1.35            | 45.3   |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C   | 1:17:A:TRP:N  | 20                  | 44.5  | 3.4             | 45.0   |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C  | 1:128:A:LYS:N | 20                  | 43.1  | 3.22            | 42.76  |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C   | 1:18:A:ARG:N  | 20                  | 43.03 | 2.31            | 43.68  |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C   | 1:15:A:LYS:N  | 20                  | 42.61 | 1.99            | 42.56  |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C   | 1:77:A:LYS:N  | 20                  | 41.11 | 6.43            | 42.1   |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C   | 1:36:A:TRP:N  | 20                  | 41.09 | 8.11            | 38.89  |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 20                  | 40.86 | 23.8            | 30.84  |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C  | 1:117:A:GLN:N | 20                  | 40.41 | 1.87            | 40.25  |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C  | 1:115:A:GLN:N | 20                  | 40.1  | 2.55            | 39.94  |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C  | 1:132:A:GLU:N | 20                  | 40.04 | 1.71            | 39.38  |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C  | 1:114:A:GLU:N | 20                  | 39.99 | 6.32            | 43.46  |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C   | 1:26:A:ILE:N  | 20                  | 39.84 | 2.82            | 39.48  |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C  | 1:124:A:LEU:N | 20                  | 39.06 | 7.65            | 43.9   |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C  | 1:116:A:GLN:N | 20                  | 38.78 | 1.87            | 39.09  |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C  | 1:122:A:ALA:N | 20                  | 38.38 | 1.53            | 38.92  |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C   | 1:16:A:VAL:N  | 20                  | 37.95 | 1.7             | 37.48  |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C  | 1:126:A:ASN:N | 20                  | 37.76 | 1.67            | 37.66  |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C  | 1:123:A:ILE:N | 20                  | 37.5  | 4.82            | 35.06  |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C  | 1:119:A:GLY:N | 20                  | 37.45 | 2.29            | 37.42  |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C   | 1:14:A:GLY:N  | 20                  | 36.31 | 5.25            | 38.14  |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C   | 1:24:A:GLU:N  | 20                  | 35.91 | 3.16            | 36.39  |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C  | 1:127:A:PHE:N | 20                  | 35.79 | 1.95            | 35.67  |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C   | 1:19:A:ALA:N  | 20                  | 35.08 | 5.63            | 38.07  |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C  | 1:121:A:GLN:N | 20                  | 34.99 | 2.03            | 34.81  |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C   | 1:27:A:LYS:N  | 20                  | 34.97 | 8.18            | 35.42  |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C  | 1:130:A:HIS:N | 20                  | 34.86 | 2.5             | 34.33  |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C   | 1:25:A:ASP:N  | 20                  | 34.26 | 1.6             | 34.22  |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C   | 1:62:A:MET:N  | 20                  | 32.95 | 8.0             | 30.34  |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C  | 1:125:A:ASN:N | 20                  | 32.64 | 1.51            | 32.86  |

Continued on next page...

Continued from previous page...

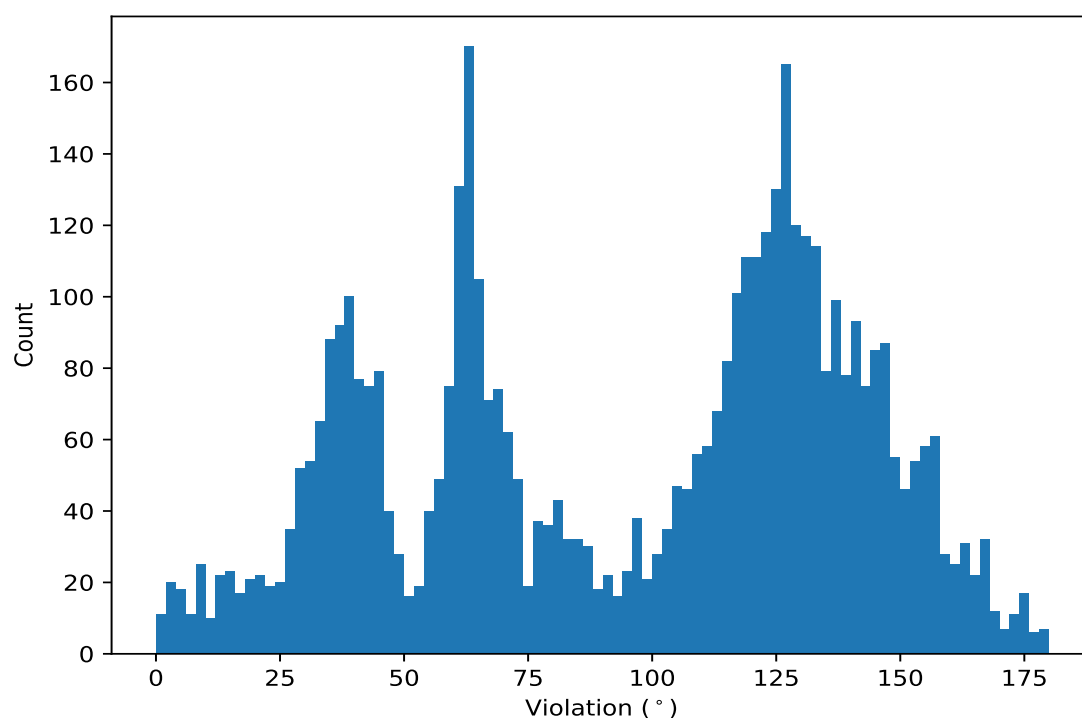
| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 20                  | 31.78 | 2.32            | 31.66  |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 20                  | 31.42 | 2.44            | 31.19  |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 20                  | 30.34 | 3.15            | 30.06  |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 20                  | 27.57 | 4.91            | 28.92  |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 20                  | 27.04 | 1.29            | 27.24  |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 20                  | 23.89 | 7.85            | 23.71  |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 20                  | 23.1  | 3.49            | 21.92  |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 20                  | 22.7  | 3.77            | 21.49  |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 20                  | 22.51 | 12.54           | 29.57  |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 20                  | 18.84 | 7.83            | 16.07  |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 20                  | 16.25 | 1.67            | 15.88  |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 20                  | 14.03 | 4.17            | 12.33  |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 20                  | 13.57 | 9.46            | 9.27   |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 20                  | 10.53 | 5.75            | 13.06  |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 20                  | 6.53  | 2.62            | 6.64   |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 19                  | 8.05  | 3.21            | 8.22   |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 15                  | 6.98  | 6.68            | 4.68   |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 13                  | 10.44 | 11.99           | 4.29   |

<sup>1</sup> Number of violated models, <sup>2</sup>Standard deviation, All angle values are in degree (°)

## 10.5 All violated dihedral-angle restraints ⓘ

### 10.5.1 Histogram : Distribution of violations ⓘ

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 (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C | 2        | 178.94        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 10       | 178.71        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 5        | 178.6         |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 4        | 178.56        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 13       | 178.43        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 8        | 178.13        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 2        | 178.08        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 17       | 177.74        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 17       | 177.51        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 9        | 177.1         |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 10       | 176.9         |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 7        | 176.69        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 16       | 176.6         |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 20       | 175.67        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 3        | 175.6         |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C | 3        | 175.48        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 18       | 175.41        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 19       | 175.4         |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 16       | 175.38        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 3        | 175.32        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 7        | 175.29        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 5        | 175.28        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 14       | 175.22        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 12       | 175.19        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 20       | 175.02        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 7        | 174.58        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 9        | 174.51        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 6        | 174.19        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 2        | 174.1         |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C | 1        | 174.08        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 5        | 173.99        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 3        | 173.78        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 13       | 173.69        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 6        | 173.68        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 1        | 173.4         |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 12       | 173.33        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 2        | 173.31        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 19       | 173.06        |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 11       | 172.85        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 7        | 172.32        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 1        | 172.25        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 15       | 171.7         |
| (1,172) | 1:97:A:GLN:C | 1:98:A:GLY:N  | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C | 15       | 171.19        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 10       | 170.87        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 13       | 170.69        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N | 1        | 170.41        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 15       | 170.15        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 19       | 170.0         |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 2        | 169.84        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 18       | 169.72        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 15       | 169.58        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 11       | 169.31        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 18       | 168.99        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 14       | 168.97        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 11       | 168.77        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 17       | 168.29        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 8        | 168.07        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 10       | 168.02        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 2        | 168.02        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 14       | 168.01        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 1        | 167.85        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 12       | 167.5         |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 16       | 167.44        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 4        | 167.43        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 14       | 167.16        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N | 3        | 167.15        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C | 2        | 167.12        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 12       | 167.05        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 10       | 167.01        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 11       | 166.97        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 11       | 166.9         |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 3        | 166.82        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 4        | 166.79        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 20       | 166.78        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 20       | 166.74        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 6        | 166.73        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 18       | 166.66        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N | 10       | 166.63        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 4        | 166.62        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 15       | 166.59        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 14       | 166.54        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N | 5        | 166.53        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 5        | 166.52        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 14       | 166.52        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C | 7        | 166.51        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 19       | 166.25        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 8        | 166.24        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 6        | 166.18        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 16       | 166.15        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C | 5        | 166.15        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 20       | 166.07        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 20       | 166.02        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 8        | 165.76        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N | 15       | 165.75        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 20       | 165.72        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 17       | 165.62        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 19       | 165.6         |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 1        | 165.57        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 15       | 165.54        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N | 4        | 165.36        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C | 10       | 165.26        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 12       | 165.24        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 19       | 165.0         |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 2        | 164.89        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 9        | 164.81        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 4        | 164.75        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 13       | 164.58        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C | 2        | 164.47        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C | 9        | 164.46        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 16       | 164.31        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 8        | 164.3         |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 9        | 164.19        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 16       | 164.07        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C | 13       | 164.03        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N | 9        | 163.89        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 18       | 163.74        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 19       | 163.7         |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 13       | 163.7         |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 16       | 163.54        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 12       | 163.52        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 11       | 163.41        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 6        | 163.31        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N | 6        | 163.3         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C | 6        | 163.26        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 8        | 163.06        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 3        | 162.98        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 5        | 162.91        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N | 7        | 162.9         |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 17       | 162.87        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 10       | 162.82        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 4        | 162.78        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 18       | 162.77        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C | 13       | 162.75        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N | 2        | 162.73        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 14       | 162.64        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 6        | 162.59        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 13       | 162.41        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 12       | 162.24        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 7        | 162.22        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 9        | 162.18        |
| (1,173) | 1:98:A:GLY:N | 1:98:A:GLY:CA | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N | 17       | 162.17        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C | 2        | 162.11        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N | 10       | 162.03        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N | 1        | 162.02        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C | 3        | 162.01        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N | 13       | 161.98        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N | 17       | 161.88        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N | 3        | 161.81        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C | 6        | 161.72        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 20       | 161.7         |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N | 12       | 161.69        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 13       | 161.66        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C | 6        | 161.63        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C | 4        | 161.44        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 1        | 161.34        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C | 8        | 161.2         |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N | 18       | 161.15        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C | 6        | 161.06        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C | 4        | 160.97        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N | 1:63:A:GLY:CA | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N | 6        | 160.96        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C | 15       | 160.9         |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 13       | 160.67        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 3        | 160.66        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C | 3        | 160.57        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C | 17       | 160.55        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N | 1        | 160.41        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N | 20       | 160.35        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 5        | 160.14        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N | 7        | 160.07        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C | 9        | 160.06        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C | 1        | 159.92        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C | 17       | 159.9         |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N | 19       | 159.88        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N | 4        | 159.73        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 18       | 159.42        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 3        | 159.42        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N  | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N  | 9        | 159.14        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 18       | 159.11        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 14       | 159.08        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 14       | 159.02        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 11       | 158.97        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 14       | 158.92        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 4        | 158.79        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 15       | 158.74        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 5        | 158.73        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 8        | 158.65        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 2        | 158.57        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 12       | 158.55        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 1        | 158.49        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 4        | 158.48        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 5        | 158.45        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 11       | 158.44        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 6        | 158.26        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 16       | 158.24        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 8        | 158.21        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 16       | 158.1         |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 6        | 158.08        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 10       | 158.08        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 15       | 157.99        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 8        | 157.97        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 15       | 157.94        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 9        | 157.91        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 1        | 157.89        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 7        | 157.88        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 16       | 157.86        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 8        | 157.8         |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 2        | 157.8         |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 20       | 157.78        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 4        | 157.76        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 6        | 157.71        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C  | 1:46:A:ARG:N   | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C  | 1        | 157.67        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 2        | 157.62        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 10       | 157.6         |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 18       | 157.44        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 2        | 157.4         |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 3        | 157.37        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 8        | 157.29        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 10       | 157.27        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 14       | 157.27        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 7        | 157.18        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 4        | 157.18        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 1        | 157.11        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N  | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N  | 17       | 157.11        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 8        | 157.08        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 1        | 157.05        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 20       | 157.04        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 7        | 157.03        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 9        | 157.03        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 6        | 157.0         |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 14       | 156.99        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 12       | 156.97        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 15       | 156.95        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 10       | 156.94        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 19       | 156.93        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 12       | 156.9         |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 5        | 156.86        |
| (1,150) | 1:86:A:ARG:N  | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N  | 2        | 156.81        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 3        | 156.79        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 20       | 156.7         |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 19       | 156.68        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 13       | 156.67        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 16       | 156.64        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 9        | 156.63        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 5        | 156.62        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 19       | 156.6         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 4        | 156.54        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 17       | 156.51        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 20       | 156.43        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 15       | 156.43        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 13       | 156.39        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 9        | 156.33        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 7        | 156.32        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 15       | 156.3         |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 18       | 156.29        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 17       | 156.16        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 14       | 156.16        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 12       | 156.15        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 17       | 156.14        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 2        | 156.12        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 8        | 155.96        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 7        | 155.91        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 13       | 155.9         |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 13       | 155.89        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 6        | 155.84        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 8        | 155.83        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 18       | 155.72        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 11       | 155.68        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 7        | 155.64        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 8        | 155.63        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 7        | 155.63        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 19       | 155.59        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 3        | 155.51        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 12       | 155.47        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 19       | 155.43        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 18       | 155.4         |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 11       | 155.35        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 20       | 155.35        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 9        | 155.32        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 8        | 155.3         |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 15       | 155.28        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 15       | 155.27        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 13       | 155.25        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 15       | 155.24        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 4        | 155.22        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 2        | 155.21        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 18       | 155.16        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 2        | 155.15        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 14       | 155.14        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 16       | 155.13        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 9        | 155.12        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 8        | 154.91        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 6        | 154.87        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 14       | 154.86        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 11       | 154.86        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 11       | 154.84        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 11       | 154.81        |
| (1,106) | 1:62:A:MET:N  | 1:62:A:MET:CA  | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N  | 5        | 154.81        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 10       | 154.79        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 3        | 154.79        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 12       | 154.75        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 1        | 154.74        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 4        | 154.67        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 14       | 154.67        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 20       | 154.65        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 20       | 154.64        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 20       | 154.63        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 19       | 154.52        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 5        | 154.51        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 9        | 154.49        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 20       | 154.48        |
| (1,73)  | 1:45:A:LEU:C  | 1:46:A:ARG:N   | 1:46:A:ARG:CA | 1:46:A:ARG:C  | 3        | 154.46        |
| (1,118) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N  | 1        | 154.4         |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 12       | 154.32        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 19       | 154.32        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 18       | 154.24        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 14       | 154.18        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 10       | 154.11        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 12       | 153.95        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 7        | 153.93        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 17       | 153.78        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 11       | 153.77        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 17       | 153.77        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 18       | 153.75        |
| (1,168) | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1:96:A:PRO:N  | 10       | 153.73        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 17       | 153.71        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 10       | 153.68        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 19       | 153.67        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 14       | 153.65        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 12       | 153.64        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 19       | 153.62        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 9        | 153.57        |
| (1,108) | 1:63:A:GLY:N  | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N  | 2        | 153.47        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 13       | 153.37        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 8        | 153.34        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 7        | 153.31        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 9        | 153.24        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 8        | 153.18        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 4        | 153.05        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 16       | 152.99        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 3        | 152.97        |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 1        | 152.96        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1        | 152.93        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 5        | 152.92        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 17       | 152.91        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 18       | 152.87        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 16       | 152.86        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 9        | 152.84        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 2        | 152.78        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 19       | 152.72        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 17       | 152.71        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 8        | 152.67        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 16       | 152.61        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 6        | 152.57        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 2        | 152.54        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 11       | 152.51        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 13       | 152.5         |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 18       | 152.49        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 11       | 152.49        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 2        | 152.42        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA | 1:67:A:ALA:C  | 2        | 152.42        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 17       | 152.39        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 3        | 152.31        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 5        | 152.29        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 5        | 152.26        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 9        | 152.22        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 15       | 152.19        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 11       | 152.15        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 1        | 152.11        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 16       | 152.08        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 11       | 152.05        |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 3        | 152.02        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 19       | 151.95        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 4        | 151.92        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 3        | 151.9         |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 3        | 151.87        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 4        | 151.87        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 12       | 151.84        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 11       | 151.82        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 18       | 151.8         |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 20       | 151.79        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 12       | 151.75        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 13       | 151.75        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N  | 12       | 151.71        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 15       | 151.65        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 9        | 151.65        |
| (1,187) | 1:105:A:PHE:N | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 16       | 151.63        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 16       | 151.58        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 11       | 151.5         |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1        | 151.49        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 12       | 151.39        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 4        | 151.35        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 2        | 151.18        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 1        | 151.17        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 4        | 151.17        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 6        | 150.98        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 20       | 150.72        |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 2        | 150.71        |
| (1,152) | 1:87:A:THR:N  | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N  | 4        | 150.69        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 11       | 150.63        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 1        | 150.57        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 14       | 150.51        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 15       | 150.5         |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 18       | 150.47        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 3        | 150.46        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 2        | 150.44        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 9        | 150.4         |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 2        | 150.39        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 15       | 150.32        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 17       | 150.3         |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 7        | 150.28        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 17       | 150.22        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 7        | 150.19        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 19       | 150.16        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 7        | 150.14        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 16       | 150.11        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 6        | 150.1         |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 11       | 150.06        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 15       | 149.96        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 10       | 149.95        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 18       | 149.93        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 8        | 149.93        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 8        | 149.88        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 16       | 149.87        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 12       | 149.83        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 5        | 149.69        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 17       | 149.68        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 4        | 149.66        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 17       | 149.62        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 6        | 149.61        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 6        | 149.61        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1        | 149.55        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 15       | 149.5         |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 18       | 149.4         |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 10       | 149.4         |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 4        | 149.37        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 20       | 149.18        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 1        | 149.16        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 13       | 149.1         |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 14       | 149.1         |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 14       | 149.0         |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 13       | 148.89        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 8        | 148.83        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 18       | 148.79        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 17       | 148.79        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 2        | 148.79        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 3        | 148.78        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 18       | 148.73        |
| (1,117) | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1        | 148.72        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 6        | 148.71        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 4        | 148.66        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 20       | 148.66        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 19       | 148.59        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 12       | 148.58        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 14       | 148.49        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 8        | 148.45        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 13       | 148.45        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 5        | 148.44        |
| (1,105) | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N   | 1:62:A:MET:CA | 1:62:A:MET:C  | 5        | 148.44        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 3        | 148.43        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 15       | 148.38        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 11       | 148.34        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 6        | 148.29        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 7        | 148.29        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 17       | 148.28        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 20       | 148.19        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 10       | 148.18        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 7        | 148.17        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 19       | 148.14        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 14       | 148.13        |
| (1,125) | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N   | 1:72:A:LYS:CA | 1:72:A:LYS:C  | 16       | 148.12        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 4        | 148.06        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 16       | 148.06        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 9        | 147.99        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 8        | 147.94        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 1        | 147.89        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 2        | 147.88        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 18       | 147.88        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1        | 147.87        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 9        | 147.86        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 14       | 147.84        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 17       | 147.83        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 10       | 147.83        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 11       | 147.75        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 5        | 147.69        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 17       | 147.58        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 18       | 147.52        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 14       | 147.5         |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 13       | 147.48        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 11       | 147.48        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 20       | 147.46        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 2        | 147.45        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 10       | 147.37        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 14       | 147.36        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 10       | 147.36        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 5        | 147.36        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 3        | 147.34        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA  | 1:7:A:THR:C   | 7        | 147.32        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 5        | 147.31        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 2        | 147.27        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 4        | 147.26        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 20       | 147.25        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 7        | 147.24        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 4        | 147.18        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA  | 1:7:A:THR:C   | 9        | 147.14        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 9        | 147.13        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 13       | 147.1         |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 8        | 147.09        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 10       | 147.06        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 13       | 147.06        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 17       | 147.05        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 2        | 147.02        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 20       | 147.01        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 17       | 146.98        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 10       | 146.89        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 19       | 146.86        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 13       | 146.84        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 6        | 146.82        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 7        | 146.82        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 14       | 146.82        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 18       | 146.82        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 5        | 146.81        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 9        | 146.81        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 20       | 146.8         |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 13       | 146.78        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 4        | 146.77        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 18       | 146.7         |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 6        | 146.7         |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 20       | 146.64        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 16       | 146.64        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 3        | 146.63        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 13       | 146.62        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 18       | 146.62        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 15       | 146.59        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 16       | 146.56        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 6        | 146.55        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 3        | 146.54        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 14       | 146.54        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 2        | 146.51        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 5        | 146.48        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 10       | 146.44        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 13       | 146.37        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA  | 1:7:A:THR:C   | 6        | 146.36        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 7        | 146.34        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 5        | 146.28        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 13       | 146.23        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 14       | 146.22        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 12       | 146.22        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 8        | 146.22        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 10       | 146.22        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 20       | 146.21        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 20       | 146.2         |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 13       | 146.18        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 11       | 146.15        |
| (1,8)   | 1:5:A:VAL:N   | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N   | 3        | 146.13        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 10       | 146.11        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 17       | 146.08        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 12       | 146.07        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 11       | 146.03        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 14       | 146.0         |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 2        | 145.99        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 15       | 145.84        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 13       | 145.81        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 17       | 145.8         |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 15       | 145.76        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 4        | 145.75        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 13       | 145.72        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA  | 1:7:A:THR:C   | 4        | 145.69        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 7        | 145.68        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 6        | 145.67        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA  | 1:7:A:THR:C   | 8        | 145.67        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 19       | 145.65        |
| (1,80)  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 15       | 145.65        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA  | 1:7:A:THR:C   | 10       | 145.63        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 16       | 145.57        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 20       | 145.56        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 4        | 145.5         |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 10       | 145.49        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 11       | 145.47        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 16       | 145.46        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 7        | 145.44        |
| (1,16)  | 1:11:A:ALA:N  | 1:11:A:ALA:CA  | 1:11:A:ALA:C  | 1:12:A:PRO:N  | 12       | 145.44        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 18       | 145.43        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 11       | 145.43        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 8        | 145.42        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 4        | 145.37        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 19       | 145.37        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 15       | 145.36        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 8        | 145.3         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 5        | 145.29        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 1        | 145.25        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 6        | 145.23        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 19       | 145.22        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 18       | 145.21        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 13       | 145.2         |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 5        | 145.18        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 4        | 145.14        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 17       | 145.12        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1:68:A:GLY:N  | 16       | 145.12        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 17       | 145.08        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 8        | 145.06        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 16       | 145.01        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 8        | 145.0         |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 15       | 144.95        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 3        | 144.94        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 5        | 144.91        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 9        | 144.9         |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1:112:A:PRO:N | 12       | 144.89        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 9        | 144.89        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 14       | 144.88        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA  | 1:7:A:THR:C   | 5        | 144.88        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N  | 11       | 144.86        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 20       | 144.81        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 16       | 144.76        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 8        | 144.75        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 15       | 144.74        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 3        | 144.68        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 8        | 144.65        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA | 1:88:A:ALA:C  | 13       | 144.62        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 1        | 144.56        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 17       | 144.55        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 8        | 144.52        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 18       | 144.5         |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 5        | 144.46        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 7        | 144.46        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 9        | 144.46        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C  | 7        | 144.39        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 10       | 144.37        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N  | 9        | 144.34        |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 7        | 144.3         |
| (1,15)  | 1:10:A:ALA:C  | 1:11:A:ALA:N   | 1:11:A:ALA:CA | 1:11:A:ALA:C  | 6        | 144.29        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 5        | 144.29        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA | 1:52:A:SER:C  | 7        | 144.28        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 12       | 144.26        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 3        | 144.24        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C   | 1:51:A:PHE:N  | 3        | 144.24        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 19       | 144.24        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1        | 144.21        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 7        | 144.12        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 19       | 144.04        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 16       | 144.04        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 15       | 144.03        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 5        | 144.02        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 9        | 144.01        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 6        | 144.0         |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 11       | 143.96        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 6        | 143.94        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 8        | 143.84        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C   | 1:89:A:LYS:N  | 19       | 143.83        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 5        | 143.76        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 6        | 143.76        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 15       | 143.75        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 4        | 143.7         |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 12       | 143.64        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 10       | 143.6         |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 15       | 143.58        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 2        | 143.54        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 10       | 143.54        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C   | 1:89:A:LYS:N  | 18       | 143.49        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 9        | 143.46        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 13       | 143.45        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 19       | 143.44        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 1        | 143.42        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 6        | 143.4         |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 5        | 143.39        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 9        | 143.36        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 17       | 143.34        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 10       | 143.31        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 11       | 143.31        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 8        | 143.31        |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 17       | 143.3         |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 2        | 143.23        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 4        | 143.23        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 12       | 143.2         |
| (1,153) | 1:87:A:THR:C  | 1:88:A:ALA:N   | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C  | 12       | 143.18        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 17       | 143.12        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 12       | 143.04        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 19       | 143.04        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 14       | 143.01        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 11       | 142.96        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 14       | 142.95        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 10       | 142.94        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 8        | 142.92        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 19       | 142.88        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 16       | 142.83        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 3        | 142.8         |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 18       | 142.8         |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C  | 1:112:A:PRO:N | 15       | 142.76        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 11       | 142.76        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C   | 1:52:A:SER:N  | 6        | 142.74        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 13       | 142.7         |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 19       | 142.6         |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 7        | 142.59        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 5        | 142.57        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 14       | 142.55        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C   | 1:47:A:GLU:N  | 1        | 142.45        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C   | 1:89:A:LYS:N  | 2        | 142.4         |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1        | 142.4         |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 9        | 142.35        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 16       | 142.32        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 8        | 142.31        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 18       | 142.31        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 1        | 142.3         |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C   | 1:89:A:LYS:N  | 17       | 142.26        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 16       | 142.26        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 20       | 142.25        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 2        | 142.21        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C   | 1:89:A:LYS:N  | 12       | 142.18        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 14       | 142.17        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 11       | 142.16        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 9        | 142.13        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 10       | 142.13        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 2        | 142.12        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 19       | 142.09        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 18       | 142.09        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 10       | 142.09        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 15       | 142.05        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C   | 1:82:A:ALA:N  | 9        | 142.02        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 1        | 142.01        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 19       | 142.0         |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 17       | 141.99        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 16       | 141.98        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 14       | 141.98        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 17       | 141.95        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 18       | 141.94        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 3        | 141.94        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 5        | 141.93        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 12       | 141.93        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 20       | 141.92        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 18       | 141.91        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 13       | 141.9         |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N   | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 7        | 141.89        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 9        | 141.87        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 20       | 141.83        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 4        | 141.77        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 13       | 141.74        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 16       | 141.72        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 10       | 141.69        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 4        | 141.65        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 6        | 141.52        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 16       | 141.48        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 12       | 141.48        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 20       | 141.4         |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 18       | 141.4         |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 18       | 141.4         |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 19       | 141.39        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 10       | 141.39        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 2        | 141.37        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 9        | 141.23        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 4        | 141.2         |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 11       | 141.19        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 12       | 141.11        |
| (1,82)  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C   | 1:51:A:PHE:N  | 1        | 141.06        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 8        | 141.03        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1        | 141.02        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 11       | 141.01        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 17       | 141.0         |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 12       | 140.98        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 12       | 140.97        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 20       | 140.97        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 20       | 140.97        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 14       | 140.91        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 7        | 140.91        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 11       | 140.91        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 7        | 140.91        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 4        | 140.89        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 12       | 140.88        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 19       | 140.87        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 17       | 140.86        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 2        | 140.85        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 5        | 140.83        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 1        | 140.83        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 13       | 140.81        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 20       | 140.81        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 10       | 140.75        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 19       | 140.74        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 8        | 140.73        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 9        | 140.73        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 8        | 140.72        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 11       | 140.72        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 19       | 140.63        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 17       | 140.62        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 16       | 140.6         |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 17       | 140.58        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 9        | 140.54        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 16       | 140.54        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C   | 1:52:A:SER:N  | 7        | 140.52        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 5        | 140.5         |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 6        | 140.5         |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 9        | 140.46        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N   | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 5        | 140.42        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 6        | 140.41        |
| (1,154) | 1:88:A:ALA:N  | 1:88:A:ALA:CA  | 1:88:A:ALA:C   | 1:89:A:LYS:N  | 13       | 140.36        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 7        | 140.31        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 14       | 140.3         |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 16       | 140.23        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 3        | 140.19        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 10       | 140.19        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 4        | 140.19        |
| (1,116) | 1:67:A:ALA:N  | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C   | 1:68:A:GLY:N  | 3        | 140.18        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 5        | 140.16        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 17       | 140.15        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 8        | 140.13        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C   | 1:70:A:TYR:N  | 15       | 140.13        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 3        | 140.13        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 2        | 140.13        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 7        | 140.11        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C   | 1:70:A:TYR:N  | 3        | 140.05        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C   | 1:52:A:SER:N  | 9        | 140.01        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 20       | 140.01        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 12       | 140.0         |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 10       | 140.0         |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 8        | 140.0         |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 19       | 139.94        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C   | 1:52:A:SER:N  | 10       | 139.92        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 11       | 139.89        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 18       | 139.86        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 4        | 139.83        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C   | 1:56:A:GLU:N  | 1        | 139.78        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C   | 1:70:A:TYR:N  | 1        | 139.74        |
| (1,84)  | 1:51:A:PHE:N  | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C   | 1:52:A:SER:N  | 5        | 139.71        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 18       | 139.7         |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1        | 139.7         |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 3        | 139.7         |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 3        | 139.66        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 2        | 139.64        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 15       | 139.61        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 16       | 139.54        |
| (1,74)  | 1:46:A:ARG:N  | 1:46:A:ARG:CA  | 1:46:A:ARG:C   | 1:47:A:GLU:N  | 3        | 139.52        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 20       | 139.48        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 8        | 139.42        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N   | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 2        | 139.41        |
| (1,160) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:PHE:N  | 1        | 139.38        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 15       | 139.3         |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 1        | 139.29        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 1        | 139.28        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 2        | 139.23        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C   | 1:70:A:TYR:N  | 19       | 139.22        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C   | 1:56:A:GLU:N  | 3        | 139.22        |
| (1,94)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ALA:N  | 16       | 139.21        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 18       | 139.18        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 19       | 139.16        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C  | 1:112:A:PRO:N | 3        | 139.11        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 19       | 139.11        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 13       | 139.08        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 9        | 139.07        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 15       | 139.05        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 11       | 139.04        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 15       | 139.03        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 12       | 138.98        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 7        | 138.95        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 14       | 138.88        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 11       | 138.85        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C   | 1:82:A:ALA:N  | 5        | 138.84        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 19       | 138.81        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 1        | 138.73        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 12       | 138.71        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 18       | 138.67        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 13       | 138.67        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 6        | 138.67        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 14       | 138.65        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 9        | 138.62        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 19       | 138.57        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 4        | 138.55        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 1        | 138.53        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 4        | 138.52        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 6        | 138.5         |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 18       | 138.49        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 17       | 138.45        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 16       | 138.43        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C  | 1:112:A:PRO:N | 1        | 138.4         |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 11       | 138.4         |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 3        | 138.4         |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 10       | 138.39        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 8        | 138.38        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C   | 1:71:A:THR:N  | 1        | 138.34        |
| (1,198) | 1:112:A:PRO:N | 1:112:A:PRO:CA | 1:112:A:PRO:C  | 1:113:A:VAL:N | 15       | 138.3         |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C   | 1:70:A:TYR:N  | 11       | 138.29        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 19       | 138.29        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 15       | 138.28        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 15       | 138.27        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 15       | 138.25        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 4        | 138.25        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 5        | 138.23        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 3        | 138.16        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 12       | 138.14        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 11       | 138.11        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C   | 1:67:A:ALA:N  | 14       | 138.11        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 13       | 138.11        |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C   | 1:67:A:ALA:N  | 16       | 138.1         |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 4        | 138.06        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA  | 1:51:A:PHE:C  | 12       | 137.97        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 5        | 137.97        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 17       | 137.95        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 7        | 137.86        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 8        | 137.86        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1        | 137.77        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 14       | 137.77        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 10       | 137.77        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 13       | 137.7         |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 17       | 137.67        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 18       | 137.66        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 14       | 137.66        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C   | 1:67:A:ALA:N  | 20       | 137.6         |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 18       | 137.58        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 10       | 137.55        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 4        | 137.53        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 13       | 137.52        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 8        | 137.51        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 6        | 137.5         |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 6        | 137.48        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 18       | 137.47        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 1        | 137.47        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 6        | 137.45        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 7        | 137.42        |
| (1,107) | 1:62:A:MET:C  | 1:63:A:GLY:N   | 1:63:A:GLY:CA  | 1:63:A:GLY:C  | 10       | 137.41        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 14       | 137.4         |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 6        | 137.38        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 16       | 137.38        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 9        | 137.37        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 16       | 137.36        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C   | 1:91:A:GLU:N  | 13       | 137.35        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C   | 1:31:A:ALA:N  | 14       | 137.31        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 7        | 137.28        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 6        | 137.25        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 17       | 137.24        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 18       | 137.24        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 2        | 137.21        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 9        | 137.18        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 9        | 137.16        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 14       | 137.15        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 18       | 137.11        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C   | 1:91:A:GLU:N  | 18       | 137.1         |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 4        | 137.09        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 10       | 136.99        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 6        | 136.98        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 16       | 136.97        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 12       | 136.97        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 5        | 136.92        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 19       | 136.91        |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 18       | 136.91        |
| (1,120) | 1:69:A:THR:N  | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C   | 1:70:A:TYR:N  | 12       | 136.9         |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 13       | 136.88        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 5        | 136.87        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 11       | 136.86        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 13       | 136.86        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 12       | 136.84        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 4        | 136.84        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 13       | 136.83        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 2        | 136.82        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C   | 1:41:A:ALA:N  | 4        | 136.81        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 19       | 136.77        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 10       | 136.71        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 3        | 136.7         |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 20       | 136.69        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 13       | 136.68        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 3        | 136.66        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 20       | 136.66        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 12       | 136.66        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 1        | 136.64        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 17       | 136.61        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 5        | 136.6         |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C   | 1:58:A:LYS:N  | 16       | 136.58        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C    | 1:7:A:THR:N   | 20       | 136.57        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 9        | 136.54        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1        | 136.51        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C   | 1:58:A:LYS:N  | 17       | 136.5         |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 17       | 136.48        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 13       | 136.41        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:GLU:N | 7        | 136.4         |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 16       | 136.4         |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C   | 1:67:A:ALA:N  | 12       | 136.38        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 6        | 136.38        |
| (1,85)  | 1:51:A:PHE:C  | 1:52:A:SER:N   | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 9        | 136.36        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 10       | 136.33        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 8        | 136.33        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 15       | 136.32        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C   | 1:58:A:LYS:N  | 12       | 136.3         |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C   | 1:91:A:GLU:N  | 20       | 136.29        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C   | 1:65:A:ASP:N  | 15       | 136.29        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C   | 1:82:A:ALA:N  | 7        | 136.28        |
| (1,186) | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N  | 1:105:A:PHE:CA | 1:105:A:PHE:C | 6        | 136.27        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 13       | 136.23        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 14       | 136.23        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 14       | 136.21        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C   | 1:13:A:VAL:N  | 2        | 136.21        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C   | 1:83:A:PHE:N  | 19       | 136.11        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C   | 1:73:A:VAL:N  | 12       | 136.05        |
| (1,11)  | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N    | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 20       | 136.03        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 11       | 136.02        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 14       | 135.98        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 16       | 135.98        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 1        | 135.94        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 2        | 135.9         |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 11       | 135.86        |
| (1,142) | 1:81:A:TYR:N  | 1:81:A:TYR:CA  | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 10       | 135.86        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 4        | 135.82        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 5        | 135.8         |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N   | 1:54:A:ARG:CA | 1:54:A:ARG:C  | 1        | 135.77        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 15       | 135.74        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 11       | 135.73        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 15       | 135.71        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 17       | 135.71        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 16       | 135.7         |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 8        | 135.68        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 20       | 135.68        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 19       | 135.67        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 18       | 135.61        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 13       | 135.59        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 1        | 135.58        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 8        | 135.54        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 17       | 135.45        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 19       | 135.43        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 16       | 135.42        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 14       | 135.38        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 7        | 135.37        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 1        | 135.36        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 3        | 135.32        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 4        | 135.3         |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 6        | 135.29        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 16       | 135.28        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 2        | 135.26        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 17       | 135.26        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N   | 16       | 135.24        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 9        | 135.14        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 1        | 135.08        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 9        | 135.08        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 19       | 135.08        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 18       | 135.0         |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 2        | 134.95        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 20       | 134.92        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 4        | 134.91        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 4        | 134.9         |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 13       | 134.9         |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 8        | 134.9         |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N   | 14       | 134.9         |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C  | 4        | 134.86        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 4        | 134.85        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 11       | 134.83        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 15       | 134.82        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 7        | 134.81        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 10       | 134.8         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 11       | 134.79        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 3        | 134.77        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 8        | 134.71        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 6        | 134.63        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 9        | 134.56        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 20       | 134.55        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 17       | 134.52        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA | 1:37:A:HIS:C  | 12       | 134.51        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 15       | 134.5         |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 15       | 134.48        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N  | 17       | 134.43        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C  | 13       | 134.4         |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 10       | 134.36        |
| (1,17)  | 1:12:A:PRO:N  | 1:12:A:PRO:CA  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 6        | 134.36        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 19       | 134.35        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 5        | 134.35        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 1        | 134.33        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 15       | 134.32        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 4        | 134.29        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 13       | 134.29        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 11       | 134.21        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1        | 134.19        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 18       | 134.18        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 5        | 134.1         |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 15       | 134.09        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 10       | 134.02        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 14       | 134.0         |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 5        | 133.97        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 2        | 133.97        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 6        | 133.92        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 6        | 133.91        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 2        | 133.88        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 5        | 133.87        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 10       | 133.85        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 14       | 133.84        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA | 1:67:A:ALA:C  | 14       | 133.82        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 8        | 133.81        |
| (1,122) | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 2        | 133.78        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N   | 1:54:A:ARG:CA | 1:54:A:ARG:C  | 3        | 133.78        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA | 1:67:A:ALA:C  | 20       | 133.73        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 1        | 133.72        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 13       | 133.68        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 18       | 133.64        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 4        | 133.63        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 11       | 133.57        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 4        | 133.5         |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 5        | 133.5         |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 20       | 133.48        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 8        | 133.46        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 2        | 133.43        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 6        | 133.41        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 14       | 133.35        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 12       | 133.35        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 8        | 133.33        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 8        | 133.33        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 14       | 133.32        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 11       | 133.28        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 4        | 133.28        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 15       | 133.26        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N  | 12       | 133.25        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 16       | 133.22        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 1        | 133.21        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 20       | 133.17        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 7        | 133.17        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 10       | 133.15        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 19       | 133.15        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 20       | 133.14        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 16       | 133.13        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 12       | 133.13        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 7        | 133.12        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 3        | 133.08        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 17       | 133.07        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 3        | 133.04        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C  | 6        | 133.01        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N   | 1:66:A:PHE:CA | 1:66:A:PHE:C  | 2        | 133.0         |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N  | 7        | 133.0         |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N  | 1        | 133.0         |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 18       | 132.98        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 14       | 132.97        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 14       | 132.96        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 4        | 132.9         |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 3        | 132.85        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 12       | 132.84        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 19       | 132.83        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 5        | 132.83        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 4        | 132.83        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 17       | 132.82        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 20       | 132.79        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 3        | 132.78        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 3        | 132.78        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N   | 12       | 132.75        |
| (1,141) | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N   | 1:81:A:TYR:CA | 1:81:A:TYR:C  | 7        | 132.73        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 8        | 132.73        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 17       | 132.7         |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 2        | 132.7         |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 20       | 132.64        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 15       | 132.62        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 11       | 132.62        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 9        | 132.62        |
| (1,9)   | 1:5:A:VAL:C   | 1:6:A:GLU:N    | 1:6:A:GLU:CA  | 1:6:A:GLU:C   | 14       | 132.62        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 3        | 132.58        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 4        | 132.58        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 1        | 132.56        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 19       | 132.56        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 11       | 132.55        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 6        | 132.51        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 17       | 132.51        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 12       | 132.49        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 17       | 132.47        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 19       | 132.45        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 10       | 132.44        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 16       | 132.44        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 3        | 132.39        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 18       | 132.38        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 18       | 132.36        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 5        | 132.34        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 15       | 132.34        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 17       | 132.34        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 19       | 132.33        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 6        | 132.33        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 5        | 132.33        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 10       | 132.32        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 7        | 132.32        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 4        | 132.24        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 11       | 132.24        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 14       | 132.24        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 11       | 132.23        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 1        | 132.23        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 4        | 132.22        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 2        | 132.21        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 15       | 132.2         |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 1        | 132.18        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA | 1:37:A:HIS:C  | 11       | 132.18        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 20       | 132.15        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 5        | 132.13        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 7        | 132.12        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 11       | 132.09        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 16       | 132.07        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 20       | 132.07        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 13       | 132.05        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 8        | 132.02        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 2        | 131.98        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 17       | 131.96        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 15       | 131.94        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 13       | 131.91        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 1        | 131.87        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 7        | 131.86        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 18       | 131.86        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 13       | 131.85        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 12       | 131.85        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 15       | 131.84        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 10       | 131.81        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 17       | 131.8         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 1        | 131.78        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 9        | 131.77        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 20       | 131.74        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 1        | 131.73        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 1        | 131.7         |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 5        | 131.69        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 19       | 131.67        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 2        | 131.64        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 18       | 131.64        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 2        | 131.61        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 7        | 131.6         |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 12       | 131.6         |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 20       | 131.59        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1        | 131.58        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 15       | 131.56        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 3        | 131.55        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 5        | 131.55        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 12       | 131.54        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 18       | 131.54        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 20       | 131.51        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 20       | 131.5         |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 6        | 131.42        |
| (1,10)  | 1:6:A:GLU:N   | 1:6:A:GLU:CA   | 1:6:A:GLU:C   | 1:7:A:THR:N   | 3        | 131.41        |
| (1,127) | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N   | 1:73:A:VAL:CA | 1:73:A:VAL:C  | 6        | 131.4         |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 16       | 131.35        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 8        | 131.3         |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 19       | 131.29        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 8        | 131.28        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 19       | 131.28        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 16       | 131.27        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 14       | 131.24        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 11       | 131.22        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 18       | 131.2         |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 14       | 131.18        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 16       | 131.18        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 18       | 131.17        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 10       | 131.15        |
| (1,52)  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 14       | 131.15        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 12       | 131.12        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 10       | 131.11        |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA | 1:33:A:SER:C  | 3        | 131.1         |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 20       | 131.03        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 8        | 131.02        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 10       | 131.01        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 15       | 130.99        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 17       | 130.97        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 13       | 130.92        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 15       | 130.92        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 7        | 130.89        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 12       | 130.87        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 20       | 130.84        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 18       | 130.84        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 6        | 130.83        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 10       | 130.82        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 3        | 130.79        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 11       | 130.76        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 2        | 130.76        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 8        | 130.74        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1        | 130.69        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 6        | 130.67        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 13       | 130.67        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 18       | 130.61        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N  | 13       | 130.61        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 8        | 130.6         |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 5        | 130.59        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 16       | 130.58        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 4        | 130.56        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 7        | 130.54        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 18       | 130.51        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 11       | 130.51        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 5        | 130.5         |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 9        | 130.49        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 5        | 130.45        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 10       | 130.45        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 1        | 130.44        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 17       | 130.42        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 6        | 130.4         |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 13       | 130.37        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 16       | 130.35        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 5        | 130.33        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 16       | 130.33        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 9        | 130.33        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 10       | 130.32        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 12       | 130.31        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 18       | 130.29        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 17       | 130.26        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 8        | 130.24        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N  | 13       | 130.24        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 19       | 130.22        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 16       | 130.21        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 3        | 130.16        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 19       | 130.15        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 19       | 130.15        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 7        | 130.13        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 19       | 130.13        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 12       | 130.08        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 15       | 130.07        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 15       | 130.05        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 11       | 130.04        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 14       | 130.04        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 19       | 130.03        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 4        | 130.03        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 15       | 130.03        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 13       | 130.03        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 12       | 130.02        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 1:31:A:ALA:N  | 16       | 129.95        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 13       | 129.94        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 2        | 129.91        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 9        | 129.9         |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 15       | 129.88        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 17       | 129.87        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 4        | 129.85        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 16       | 129.85        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 10       | 129.84        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 7        | 129.83        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 14       | 129.83        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 7        | 129.8         |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 14       | 129.8         |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 14       | 129.8         |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 8        | 129.79        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 5        | 129.77        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 2        | 129.77        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 1        | 129.75        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 7        | 129.7         |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 20       | 129.69        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 11       | 129.66        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 17       | 129.64        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 9        | 129.64        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 11       | 129.63        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 3        | 129.6         |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 10       | 129.59        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 11       | 129.54        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 19       | 129.53        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 4        | 129.51        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 6        | 129.49        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 5        | 129.47        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 17       | 129.47        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 9        | 129.46        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 6        | 129.46        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 11       | 129.44        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 5        | 129.43        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 10       | 129.42        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 7        | 129.39        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 5        | 129.32        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 10       | 129.31        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 3        | 129.28        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 18       | 129.22        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 6        | 129.19        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 11       | 129.18        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 20       | 129.15        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 10       | 129.14        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 2        | 129.13        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 17       | 129.13        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 9        | 129.13        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 3        | 129.12        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 9        | 129.11        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 14       | 129.09        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 11       | 129.09        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 2        | 129.07        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 7        | 129.07        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 3        | 129.06        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 17       | 129.06        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 16       | 129.04        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 4        | 129.02        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 5        | 129.01        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 5        | 129.01        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 15       | 128.98        |
| (1,144) | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N  | 16       | 128.95        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 9        | 128.91        |
| (1,62)  | 1:40:A:ALA:N  | 1:40:A:ALA:CA  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N  | 19       | 128.88        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 17       | 128.86        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 7        | 128.83        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 9        | 128.81        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 4        | 128.81        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 10       | 128.78        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 4        | 128.78        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 17       | 128.77        |
| (1,126) | 1:72:A:LYS:N  | 1:72:A:LYS:CA  | 1:72:A:LYS:C  | 1:73:A:VAL:N  | 9        | 128.76        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 14       | 128.76        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 1        | 128.75        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 14       | 128.71        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 8        | 128.69        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 6        | 128.69        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 1        | 128.69        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 9        | 128.67        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 11       | 128.67        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 8        | 128.66        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 20       | 128.66        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 7        | 128.65        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 9        | 128.61        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 12       | 128.6         |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 4        | 128.6         |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 13       | 128.59        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 14       | 128.58        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 10       | 128.56        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 12       | 128.55        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 14       | 128.52        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 8        | 128.5         |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 11       | 128.49        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 20       | 128.47        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 3        | 128.43        |
| (1,110) | 1:64:A:PHE:N  | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 7        | 128.43        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 18       | 128.43        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 1        | 128.42        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 13       | 128.42        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 12       | 128.42        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 9        | 128.38        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 5        | 128.38        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 8        | 128.38        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 7        | 128.37        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 20       | 128.37        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 5        | 128.36        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 20       | 128.35        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 15       | 128.33        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 20       | 128.28        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 3        | 128.27        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 10       | 128.25        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 7        | 128.2         |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA | 1:37:A:HIS:C  | 20       | 128.2         |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 15       | 128.2         |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 9        | 128.18        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 14       | 128.1         |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 3        | 128.08        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1        | 128.06        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N  | 19       | 128.05        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 6        | 127.99        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 2        | 127.93        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 18       | 127.92        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 16       | 127.92        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 13       | 127.9         |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 3        | 127.89        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 7        | 127.86        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 8        | 127.85        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 7        | 127.85        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 15       | 127.84        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1        | 127.84        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 8        | 127.84        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 3        | 127.84        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 8        | 127.82        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 14       | 127.8         |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1        | 127.78        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA | 1:37:A:HIS:C  | 19       | 127.78        |
| (1,83)  | 1:50:A:ALA:C  | 1:51:A:PHE:N   | 1:51:A:PHE:CA | 1:51:A:PHE:C  | 7        | 127.77        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 2        | 127.77        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N  | 19       | 127.74        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 20       | 127.74        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 12       | 127.73        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N  | 16       | 127.69        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 12       | 127.67        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 10       | 127.65        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 13       | 127.65        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 19       | 127.65        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C  | 2        | 127.65        |
| (1,155) | 1:88:A:ALA:C  | 1:89:A:LYS:N   | 1:89:A:LYS:CA | 1:89:A:LYS:C  | 2        | 127.64        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 9        | 127.64        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 18       | 127.62        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 6        | 127.58        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C  | 1:105:A:PHE:N | 6        | 127.57        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 18       | 127.57        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C    | 1:3:A:ILE:N   | 6        | 127.57        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 13       | 127.55        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 11       | 127.55        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C   | 1:67:A:ALA:N  | 10       | 127.54        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 5        | 127.54        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 20       | 127.52        |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C   | 1:81:A:TYR:N  | 7        | 127.51        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C    | 1:8:A:THR:N   | 12       | 127.51        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 13       | 127.5         |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 10       | 127.5         |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C   | 1:90:A:VAL:N  | 17       | 127.48        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C   | 1:90:A:VAL:N  | 7        | 127.44        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C    | 1:4:A:THR:N   | 4        | 127.44        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 11       | 127.43        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 14       | 127.43        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 6        | 127.41        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 18       | 127.4         |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 2        | 127.38        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 11       | 127.37        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C    | 1:4:A:THR:N   | 15       | 127.36        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 15       | 127.34        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 14       | 127.33        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C   | 1:67:A:ALA:N  | 5        | 127.33        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 5        | 127.33        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 18       | 127.32        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 20       | 127.32        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA  | 1:67:A:ALA:C  | 1        | 127.31        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C  | 1:105:A:PHE:N | 11       | 127.3         |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C    | 1:4:A:THR:N   | 1        | 127.3         |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 2        | 127.29        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 8        | 127.27        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C  | 1:107:A:ALA:N | 6        | 127.26        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 15       | 127.25        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 4        | 127.25        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 3        | 127.24        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 18       | 127.2         |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 20       | 127.19        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 12       | 127.16        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 13       | 127.16        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 12       | 127.15        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 6        | 127.14        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 14       | 127.14        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 8        | 127.13        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 6        | 127.13        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 12       | 127.13        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C  | 1:105:A:PHE:N | 4        | 127.12        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 7        | 127.12        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 4        | 127.1         |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 17       | 127.1         |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 20       | 127.1         |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N  | 15       | 127.05        |
| (1,114) | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N  | 1        | 127.05        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 3        | 127.04        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA | 1:42:A:THR:C  | 4        | 127.02        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 12       | 127.0         |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 9        | 126.99        |
| (1,6)   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N   | 16       | 126.99        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 17       | 126.98        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 4        | 126.97        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 2        | 126.97        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 11       | 126.94        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 19       | 126.93        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 8        | 126.9         |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 3        | 126.9         |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N  | 2        | 126.87        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 11       | 126.87        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 1:23:A:PRO:N  | 4        | 126.81        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 9        | 126.8         |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA  | 1:5:A:VAL:C   | 17       | 126.77        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 16       | 126.76        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 14       | 126.76        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 5        | 126.75        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA | 1:82:A:ALA:C  | 13       | 126.75        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 8        | 126.74        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 3        | 126.74        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 6        | 126.73        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 1:23:A:PRO:N  | 10       | 126.71        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 3        | 126.7         |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 9        | 126.7         |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1        | 126.7         |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 20       | 126.66        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 16       | 126.66        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 9        | 126.65        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 17       | 126.65        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C  | 13       | 126.62        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C  | 19       | 126.6         |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 12       | 126.56        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 3        | 126.54        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 11       | 126.47        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 19       | 126.46        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 7        | 126.46        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 3        | 126.44        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 19       | 126.44        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 11       | 126.43        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 19       | 126.43        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 18       | 126.42        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 18       | 126.41        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 18       | 126.4         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA | 1:37:A:HIS:C  | 15       | 126.38        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 6        | 126.37        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 7        | 126.36        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 4        | 126.32        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 10       | 126.31        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 15       | 126.31        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N  | 3        | 126.29        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 15       | 126.27        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C  | 18       | 126.26        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 13       | 126.24        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA | 1:82:A:ALA:C  | 4        | 126.23        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 16       | 126.22        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 16       | 126.22        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 17       | 126.21        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 16       | 126.2         |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 4        | 126.17        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA | 1:64:A:PHE:C  | 19       | 126.16        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 19       | 126.15        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 18       | 126.14        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 15       | 126.14        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 19       | 126.14        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 3        | 126.13        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 16       | 126.13        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 1:23:A:PRO:N  | 7        | 126.1         |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 13       | 126.07        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 5        | 126.06        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 18       | 126.06        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 19       | 126.06        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 5        | 126.06        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C  | 9        | 126.04        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C  | 17       | 126.03        |
| (1,12)  | 1:7:A:THR:N   | 1:7:A:THR:CA   | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 16       | 126.0         |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 8        | 126.0         |
| (1,140) | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1:81:A:TYR:N  | 9        | 125.98        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 11       | 125.96        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 12       | 125.95        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 16       | 125.94        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 1        | 125.93        |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA | 1:87:A:THR:C  | 16       | 125.93        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N  | 1        | 125.93        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C  | 9        | 125.92        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 5        | 125.91        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 12       | 125.9         |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 10       | 125.86        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 14       | 125.83        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 11       | 125.82        |
| (1,191) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:GLU:N | 2        | 125.81        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 16       | 125.79        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C  | 12       | 125.77        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1        | 125.75        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C  | 9        | 125.75        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 20       | 125.74        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 20       | 125.74        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C   | 1:31:A:ALA:N  | 18       | 125.73        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 16       | 125.72        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 3        | 125.69        |
| (1,135) | 1:77:A:LYS:C  | 1:78:A:ARG:N   | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C  | 5        | 125.66        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 13       | 125.65        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 2        | 125.65        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 7        | 125.64        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 18       | 125.64        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 16       | 125.61        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 14       | 125.6         |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 13       | 125.6         |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 5        | 125.58        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 2        | 125.58        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 15       | 125.58        |
| (1,189) | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C  | 1:107:A:ALA:N | 9        | 125.52        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C    | 1:4:A:THR:N   | 5        | 125.51        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 13       | 125.48        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 6        | 125.46        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 9        | 125.45        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 9        | 125.43        |
| (1,64)  | 1:41:A:ALA:N  | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C   | 1:42:A:THR:N  | 2        | 125.4         |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C   | 1:91:A:GLU:N  | 9        | 125.39        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 14       | 125.39        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 12       | 125.36        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 8        | 125.36        |
| (1,137) | 1:78:A:ARG:C  | 1:79:A:ILE:N   | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 7        | 125.35        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 11       | 125.3         |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 15       | 125.27        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 7        | 125.27        |
| (1,7)   | 1:4:A:THR:C   | 1:5:A:VAL:N    | 1:5:A:VAL:CA   | 1:5:A:VAL:C   | 3        | 125.24        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C   | 1:43:A:VAL:N  | 14       | 125.23        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 6        | 125.19        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 5        | 125.19        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C   | 1:90:A:VAL:N  | 11       | 125.18        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C    | 1:3:A:ILE:N   | 13       | 125.14        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 5        | 125.11        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 9        | 125.09        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 13       | 125.09        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 4        | 125.09        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 7        | 125.08        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 7        | 125.06        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 5        | 125.06        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 10       | 124.99        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 4        | 124.99        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C   | 1:90:A:VAL:N  | 12       | 124.99        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 6        | 124.99        |
| (1,4)   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C    | 1:4:A:THR:N   | 2        | 124.97        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C   | 1:53:A:SER:N  | 10       | 124.96        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 3        | 124.93        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 1:9:A:VAL:N   | 9        | 124.93        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 4        | 124.93        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 17       | 124.92        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 11       | 124.92        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA | 1:43:A:VAL:C  | 12       | 124.91        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 20       | 124.9         |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA | 1:56:A:GLU:C  | 1        | 124.89        |
| (1,115) | 1:66:A:PHE:C  | 1:67:A:ALA:N   | 1:67:A:ALA:CA | 1:67:A:ALA:C  | 15       | 124.87        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 1:9:A:VAL:N   | 1        | 124.87        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 14       | 124.85        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 20       | 124.81        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 5        | 124.81        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1        | 124.78        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 1:9:A:VAL:N   | 6        | 124.78        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 2        | 124.76        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 14       | 124.75        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 17       | 124.73        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA | 1:86:A:ARG:C  | 6        | 124.71        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 5        | 124.66        |
| (1,158) | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N  | 7        | 124.64        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 12       | 124.61        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 16       | 124.61        |
| (1,96)  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1        | 124.57        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 19       | 124.57        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 7        | 124.56        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 10       | 124.51        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 19       | 124.5         |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 10       | 124.5         |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 18       | 124.49        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 3        | 124.47        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 20       | 124.46        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 19       | 124.44        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA | 1:41:A:ALA:C  | 19       | 124.42        |
| (1,156) | 1:89:A:LYS:N  | 1:89:A:LYS:CA  | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 16       | 124.4         |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 15       | 124.39        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1:105:A:PHE:N | 12       | 124.37        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 11       | 124.37        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 1:9:A:VAL:N   | 8        | 124.34        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C  | 17       | 124.33        |
| (1,66)  | 1:42:A:THR:N  | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N  | 8        | 124.33        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA | 1:53:A:SER:C  | 13       | 124.32        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 2        | 124.3         |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 11       | 124.29        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 12       | 124.29        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 9        | 124.29        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N  | 11       | 124.25        |
| (1,86)  | 1:52:A:SER:N  | 1:52:A:SER:CA  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 5        | 124.24        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 8        | 124.22        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA | 1:82:A:ALA:C  | 2        | 124.21        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 15       | 124.16        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 7        | 124.14        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 8        | 124.14        |
| (1,67)  | 1:42:A:THR:C  | 1:43:A:VAL:N   | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 16       | 124.14        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 12       | 124.1         |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 6        | 124.08        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 8        | 124.08        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 4        | 124.04        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 1        | 124.03        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 5        | 124.03        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 20       | 124.02        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 20       | 124.0         |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 10       | 123.98        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 4        | 123.94        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 15       | 123.93        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 2        | 123.9         |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 10       | 123.9         |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C  | 1:105:A:PHE:N | 14       | 123.88        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 14       | 123.88        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 19       | 123.87        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 13       | 123.85        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C  | 1:105:A:PHE:N | 20       | 123.84        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 16       | 123.84        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 4        | 123.78        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 20       | 123.77        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 11       | 123.75        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 10       | 123.74        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 11       | 123.72        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 3        | 123.7         |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 4        | 123.67        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 17       | 123.66        |
| (1,175) | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C   | 1:100:A:THR:N | 10       | 123.65        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 20       | 123.64        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 17       | 123.64        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 13       | 123.63        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 14       | 123.63        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 4        | 123.61        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 10       | 123.59        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 15       | 123.58        |
| (1,63)  | 1:40:A:ALA:C  | 1:41:A:ALA:N   | 1:41:A:ALA:CA  | 1:41:A:ALA:C  | 1        | 123.57        |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N   | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 1        | 123.56        |
| (1,185) | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C  | 1:105:A:PHE:N | 18       | 123.55        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 2        | 123.51        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 13       | 123.5         |
| (1,151) | 1:86:A:ARG:C  | 1:87:A:THR:N   | 1:87:A:THR:CA  | 1:87:A:THR:C  | 2        | 123.47        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 12       | 123.47        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 14       | 123.46        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 18       | 123.4         |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C   | 1:44:A:ASP:N  | 17       | 123.39        |
| (1,109) | 1:63:A:GLY:C  | 1:64:A:PHE:N   | 1:64:A:PHE:CA  | 1:64:A:PHE:C  | 12       | 123.37        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 15       | 123.35        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 19       | 123.35        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 20       | 123.35        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 14       | 123.33        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 10       | 123.31        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 10       | 123.28        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 13       | 123.26        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 14       | 123.26        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 2        | 123.26        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 13       | 123.21        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 13       | 123.13        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 16       | 123.11        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 16       | 123.11        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 13       | 123.11        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 2        | 123.09        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C   | 1:44:A:ASP:N  | 13       | 123.07        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 2        | 123.07        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 9        | 123.07        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 14       | 123.02        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 4        | 123.01        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 17       | 122.97        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 14       | 122.95        |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N   | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 3        | 122.94        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C   | 1:44:A:ASP:N  | 2        | 122.85        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 19       | 122.79        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 6        | 122.78        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 8        | 122.76        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 7        | 122.75        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 6        | 122.75        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 11       | 122.73        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 5        | 122.73        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 14       | 122.73        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 7        | 122.71        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 20       | 122.7         |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 14       | 122.65        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 12       | 122.61        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 10       | 122.61        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 3        | 122.6         |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 4        | 122.6         |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 17       | 122.58        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 8        | 122.53        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 6        | 122.51        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 6        | 122.5         |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 13       | 122.5         |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 4        | 122.49        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 1        | 122.47        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 2        | 122.45        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 4        | 122.44        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 4        | 122.42        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 18       | 122.42        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 6        | 122.37        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 8        | 122.35        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 17       | 122.35        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 3        | 122.35        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 18       | 122.34        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 16       | 122.33        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 20       | 122.32        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 17       | 122.32        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 5        | 122.29        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA | 1:69:A:THR:C  | 6        | 122.29        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 1:85:A:ASP:N  | 10       | 122.28        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 10       | 122.25        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 8        | 122.25        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 13       | 122.24        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 11       | 122.23        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 7        | 122.22        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 8        | 122.21        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 6        | 122.21        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA | 1:37:A:HIS:C  | 8        | 122.2         |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 4        | 122.18        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 16       | 122.18        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 12       | 122.18        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 1:85:A:ASP:N  | 20       | 122.15        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 1:23:A:PRO:N  | 1        | 122.15        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 8        | 122.14        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 1:23:A:PRO:N  | 14       | 122.14        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 5        | 122.1         |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 3        | 122.08        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 6        | 122.05        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 3        | 122.04        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 16       | 121.99        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 15       | 121.99        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 1:85:A:ASP:N  | 15       | 121.96        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 5        | 121.95        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 9        | 121.93        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C  | 3        | 121.93        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 7        | 121.91        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 1:23:A:PRO:N  | 15       | 121.9         |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 2        | 121.89        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 1:9:A:VAL:N   | 10       | 121.89        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 13       | 121.88        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 1:9:A:VAL:N   | 12       | 121.88        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N  | 9        | 121.86        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 8        | 121.83        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA | 1:39:A:THR:C  | 17       | 121.83        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 9        | 121.82        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 8        | 121.81        |
| (1,68)  | 1:43:A:VAL:N  | 1:43:A:VAL:CA  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 3        | 121.79        |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N   | 1:29:A:TRP:CA | 1:29:A:TRP:C  | 3        | 121.78        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 9        | 121.75        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 13       | 121.69        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 9        | 121.69        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA | 1:91:A:GLU:C  | 9        | 121.68        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 4        | 121.67        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA | 1:82:A:ALA:C  | 8        | 121.66        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 7        | 121.65        |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N   | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1        | 121.65        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 6        | 121.63        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 5        | 121.59        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 20       | 121.59        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 19       | 121.57        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 3        | 121.56        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 6        | 121.53        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 18       | 121.53        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 16       | 121.51        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 20       | 121.42        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 20       | 121.42        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 7        | 121.41        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 18       | 121.37        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 19       | 121.37        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 15       | 121.34        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 16       | 121.31        |
| (1,92)  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C   | 1:56:A:GLU:N  | 8        | 121.3         |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 1        | 121.21        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 15       | 121.21        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 17       | 121.19        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 4        | 121.16        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 9        | 121.15        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 10       | 121.14        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 7        | 121.1         |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 16       | 121.1         |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 11       | 121.09        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 9        | 121.07        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 6        | 121.05        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 4        | 121.05        |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N   | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 2        | 121.05        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 12       | 121.01        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 1        | 121.01        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 12       | 120.96        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 1        | 120.94        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 1        | 120.93        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 9        | 120.89        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 17       | 120.89        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 6        | 120.89        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 1        | 120.88        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 2        | 120.88        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 11       | 120.85        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 4        | 120.84        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 19       | 120.84        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 18       | 120.81        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 19       | 120.8         |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 13       | 120.79        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 10       | 120.78        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 6        | 120.76        |
| (1,58)  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C   | 1:38:A:THR:N  | 15       | 120.76        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 5        | 120.73        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 3        | 120.72        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 8        | 120.7         |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 15       | 120.69        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 14       | 120.68        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 7        | 120.67        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C    | 1:3:A:ILE:N   | 15       | 120.63        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 17       | 120.62        |
| (1,128) | 1:73:A:VAL:N  | 1:73:A:VAL:CA  | 1:73:A:VAL:C   | 1:74:A:VAL:N  | 15       | 120.62        |
| (1,65)  | 1:41:A:ALA:C  | 1:42:A:THR:N   | 1:42:A:THR:CA  | 1:42:A:THR:C  | 7        | 120.62        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 4        | 120.59        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 5        | 120.58        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 12       | 120.56        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 17       | 120.56        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 2        | 120.45        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 8        | 120.45        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 3        | 120.44        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 12       | 120.43        |
| (1,177) | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C  | 1:101:A:VAL:N | 9        | 120.42        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 8        | 120.42        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 15       | 120.41        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 17       | 120.35        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 15       | 120.34        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 11       | 120.33        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 2        | 120.32        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 8        | 120.31        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 5        | 120.23        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 5        | 120.22        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 8        | 120.2         |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 8        | 120.2         |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 8        | 120.14        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 19       | 120.12        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 3        | 120.1         |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 1        | 120.08        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 14       | 120.05        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 9        | 120.03        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 5        | 119.97        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 15       | 119.96        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 7        | 119.93        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 12       | 119.9         |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 13       | 119.89        |
| (1,164) | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C   | 1:94:A:GLU:N  | 9        | 119.88        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 5        | 119.86        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 20       | 119.85        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 10       | 119.85        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 3        | 119.83        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 6        | 119.83        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 11       | 119.77        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 5        | 119.77        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 10       | 119.74        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 9        | 119.74        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N   | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 1        | 119.73        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 3        | 119.73        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 7        | 119.72        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 5        | 119.72        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 15       | 119.71        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 19       | 119.71        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 20       | 119.7         |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 17       | 119.69        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 1        | 119.68        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 18       | 119.61        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 11       | 119.56        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 16       | 119.54        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 19       | 119.53        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 20       | 119.48        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 18       | 119.46        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 18       | 119.44        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 10       | 119.42        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 20       | 119.38        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 18       | 119.37        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 19       | 119.34        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 14       | 119.33        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 18       | 119.33        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 7        | 119.32        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 10       | 119.32        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 14       | 119.31        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 19       | 119.26        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 9        | 119.19        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 20       | 119.19        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 6        | 119.17        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 18       | 119.17        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 15       | 119.17        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 4        | 119.12        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 9        | 119.12        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 19       | 119.1         |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 11       | 119.08        |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C   | 1:31:A:ALA:N  | 20       | 119.06        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 10       | 119.05        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 1        | 119.03        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 11       | 119.0         |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 9        | 118.99        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C    | 1:3:A:ILE:N   | 18       | 118.96        |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:THR:N   | 1:69:A:THR:CA  | 1:69:A:THR:C  | 2        | 118.95        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 12       | 118.94        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 16       | 118.92        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 7        | 118.92        |
| (1,14)  | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C    | 1:9:A:VAL:N   | 14       | 118.91        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 8        | 118.89        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 18       | 118.87        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 3        | 118.87        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 7        | 118.86        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 9        | 118.84        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 14       | 118.83        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 6        | 118.79        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 16       | 118.75        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 8        | 118.73        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 11       | 118.72        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 15       | 118.7         |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 12       | 118.69        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 9        | 118.69        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 1        | 118.67        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 1        | 118.64        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 3        | 118.56        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 14       | 118.54        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 4        | 118.51        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 4        | 118.5         |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N   | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 6        | 118.5         |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 5        | 118.46        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 7        | 118.44        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 15       | 118.4         |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 1        | 118.4         |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 16       | 118.4         |
| (1,50)  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C   | 1:31:A:ALA:N  | 19       | 118.4         |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 4        | 118.38        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 5        | 118.37        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 2        | 118.37        |
| (1,129) | 1:73:A:VAL:C  | 1:74:A:VAL:N   | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C  | 13       | 118.37        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 17       | 118.37        |
| (1,159) | 1:90:A:VAL:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 10       | 118.35        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 10       | 118.35        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 10       | 118.31        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 4        | 118.3         |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 4        | 118.3         |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 19       | 118.24        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 14       | 118.23        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA  | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 3        | 118.21        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 3        | 118.21        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 16       | 118.16        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 14       | 118.16        |
| (1,93)  | 1:55:A:MET:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 2        | 118.16        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 1        | 118.14        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 15       | 118.13        |
| (1,181) | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C  | 1:103:A:VAL:N | 20       | 118.11        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 5        | 118.07        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 11       | 118.04        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 11       | 118.03        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 6        | 118.0         |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 2        | 117.98        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 8        | 117.98        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 13       | 117.96        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 19       | 117.96        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 10       | 117.93        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 2        | 117.92        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 15       | 117.92        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 13       | 117.88        |
| (1,183) | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C  | 1:104:A:SER:N | 19       | 117.84        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 6        | 117.83        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 19       | 117.82        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 7        | 117.81        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 2        | 117.8         |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 15       | 117.79        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 5        | 117.79        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 7        | 117.79        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 16       | 117.79        |
| (1,2)   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C    | 1:3:A:ILE:N   | 2        | 117.76        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 20       | 117.75        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 8        | 117.74        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 11       | 117.71        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 18       | 117.7         |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N   | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 6        | 117.68        |
| (1,196) | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N  | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C | 2        | 117.66        |
| (1,162) | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C   | 1:93:A:LEU:N  | 18       | 117.65        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 17       | 117.64        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 14       | 117.62        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 6        | 117.59        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 17       | 117.55        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 13       | 117.55        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 18       | 117.55        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 20       | 117.54        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 2        | 117.51        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 13       | 117.5         |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 17       | 117.44        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 3        | 117.37        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 7        | 117.36        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 7        | 117.34        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 6        | 117.32        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 3        | 117.3         |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N   | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 6        | 117.3         |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 11       | 117.27        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 19       | 117.27        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 18       | 117.23        |
| (1,88)  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C   | 1:54:A:ARG:N  | 17       | 117.23        |
| (1,145) | 1:82:A:ALA:C  | 1:83:A:PHE:N   | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C  | 20       | 117.21        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 8        | 117.19        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 13       | 117.17        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 12       | 117.17        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 11       | 117.15        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 10       | 117.13        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 19       | 117.12        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 20       | 117.12        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 18       | 117.11        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 2        | 117.09        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 17       | 117.09        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 12       | 117.05        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 18       | 117.05        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 20       | 117.01        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 14       | 116.97        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 1        | 116.93        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 4        | 116.9         |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 12       | 116.88        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 16       | 116.87        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 16       | 116.86        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 9        | 116.83        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 17       | 116.81        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 17       | 116.81        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 8        | 116.77        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 10       | 116.76        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 1        | 116.74        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 9        | 116.74        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 2        | 116.73        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 17       | 116.71        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 12       | 116.69        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 18       | 116.68        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 9        | 116.68        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 20       | 116.67        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 3        | 116.62        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 12       | 116.59        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 17       | 116.57        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 5        | 116.54        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 19       | 116.52        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 3        | 116.48        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N   | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 13       | 116.4         |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 11       | 116.37        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 3        | 116.34        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 16       | 116.28        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 12       | 116.23        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 11       | 116.2         |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 14       | 116.18        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 1        | 116.18        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 7        | 116.14        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 18       | 116.11        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 12       | 116.08        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 19       | 116.07        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 11       | 116.05        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 16       | 116.02        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 13       | 116.01        |
| (1,179) | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C  | 1:102:A:ARG:N | 15       | 116.0         |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 8        | 116.0         |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 11       | 115.98        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 7        | 115.98        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 17       | 115.98        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 18       | 115.94        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 20       | 115.93        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 13       | 115.93        |
| (1,35)  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C   | 1:23:A:PRO:N  | 3        | 115.9         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N   | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 13       | 115.86        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 14       | 115.85        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 16       | 115.85        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 6        | 115.85        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 20       | 115.83        |
| (1,61)  | 1:38:A:THR:C  | 1:39:A:THR:N  | 1:39:A:THR:CA  | 1:39:A:THR:C  | 9        | 115.82        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 4        | 115.79        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 17       | 115.79        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 15       | 115.75        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 8        | 115.74        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 5        | 115.73        |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 18       | 115.71        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 1        | 115.71        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 16       | 115.66        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 4        | 115.66        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 7        | 115.64        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 11       | 115.61        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 20       | 115.59        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 18       | 115.53        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 3        | 115.5         |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 16       | 115.49        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 9        | 115.47        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 12       | 115.45        |
| (1,76)  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA | 1:47:A:GLU:C   | 1:48:A:GLY:N  | 3        | 115.41        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 10       | 115.39        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 6        | 115.39        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 10       | 115.38        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 10       | 115.36        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 10       | 115.32        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 17       | 115.3         |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 2        | 115.25        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N  | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 3        | 115.24        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 13       | 115.24        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 7        | 115.22        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 19       | 115.11        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 1        | 115.1         |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 17       | 115.0         |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 5        | 114.98        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 10       | 114.96        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 11       | 114.94        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 16       | 114.93        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 7        | 114.93        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 12       | 114.9         |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 14       | 114.88        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 6        | 114.86        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 15       | 114.86        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 9        | 114.86        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 5        | 114.84        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 7        | 114.83        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 9        | 114.83        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 14       | 114.73        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 19       | 114.7         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 20       | 114.67        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 13       | 114.62        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 2        | 114.6         |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 13       | 114.6         |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 8        | 114.54        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 12       | 114.52        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N   | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 5        | 114.52        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 11       | 114.5         |
| (1,182) | 1:102:A:ARG:C | 1:103:A:VAL:N  | 1:103:A:VAL:CA | 1:103:A:VAL:C | 19       | 114.49        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 3        | 114.46        |
| (1,197) | 1:111:A:TYR:N | 1:111:A:TYR:CA | 1:111:A:TYR:C  | 1:112:A:PRO:N | 2        | 114.32        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N   | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 10       | 114.3         |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 5        | 114.28        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 10       | 114.27        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 14       | 114.26        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 10       | 114.15        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 3        | 114.11        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 3        | 114.08        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N   | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 16       | 114.08        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 12       | 114.05        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 15       | 114.04        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 15       | 114.03        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 13       | 114.0         |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N   | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 6        | 113.95        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 13       | 113.93        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N   | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 15       | 113.93        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 12       | 113.92        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 15       | 113.89        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 6        | 113.82        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 12       | 113.8         |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N   | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 3        | 113.78        |
| (1,166) | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C   | 1:95:A:ALA:N  | 18       | 113.78        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N  | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 17       | 113.76        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N   | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 1        | 113.75        |
| (1,148) | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C   | 1:85:A:ASP:N  | 2        | 113.75        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N   | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 5        | 113.73        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA  | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 10       | 113.67        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA  | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 13       | 113.66        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 7        | 113.65        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 5        | 113.64        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N    | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 14       | 113.58        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 2        | 113.55        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N   | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 12       | 113.55        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N   | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 8        | 113.54        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N  | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 18       | 113.52        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 16       | 113.46        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N   | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 6        | 113.46        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N   | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 20       | 113.43        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA  | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 6        | 113.38        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 9        | 113.36        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N   | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 13       | 113.35        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 8        | 113.29        |
| (1,87)  | 1:52:A:SER:C  | 1:53:A:SER:N  | 1:53:A:SER:CA  | 1:53:A:SER:C  | 7        | 113.28        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 11       | 113.24        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 2        | 113.16        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 9        | 113.12        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 4        | 113.1         |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 10       | 113.04        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 15       | 113.04        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 5        | 113.0         |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 12       | 112.91        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 5        | 112.86        |
| (1,161) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:PHE:N  | 1:92:A:PHE:CA  | 1:92:A:PHE:C  | 1        | 112.79        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 19       | 112.78        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 7        | 112.73        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 6        | 112.73        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 11       | 112.72        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 4        | 112.7         |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 1        | 112.68        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 4        | 112.66        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 9        | 112.59        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 2        | 112.55        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 16       | 112.5         |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 3        | 112.5         |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 8        | 112.44        |
| (1,5)   | 1:3:A:ILE:C   | 1:4:A:THR:N   | 1:4:A:THR:CA   | 1:4:A:THR:C   | 13       | 112.44        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 2        | 112.36        |
| (1,143) | 1:81:A:TYR:C  | 1:82:A:ALA:N  | 1:82:A:ALA:CA  | 1:82:A:ALA:C  | 20       | 112.32        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 14       | 112.31        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 6        | 112.27        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 1        | 112.26        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 4        | 112.23        |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 1        | 112.22        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 15       | 112.2         |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 14       | 112.17        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 13       | 112.12        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 10       | 112.11        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 14       | 112.07        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 6        | 112.04        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 7        | 112.04        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 18       | 112.01        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 19       | 111.98        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 17       | 111.98        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 9        | 111.94        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 12       | 111.85        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 5        | 111.79        |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 3        | 111.79        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 17       | 111.77        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 7        | 111.71        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 19       | 111.7         |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 4        | 111.7         |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 6        | 111.68        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 20       | 111.66        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 16       | 111.64        |
| (1,184) | 1:103:A:VAL:C | 1:104:A:SER:N | 1:104:A:SER:CA | 1:104:A:SER:C | 18       | 111.61        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 15       | 111.6         |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 2        | 111.53        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 4        | 111.51        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 4        | 111.49        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 6        | 111.48        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 9        | 111.47        |
| (1,138) | 1:79:A:ILE:N  | 1:79:A:ILE:CA | 1:79:A:ILE:C   | 1:80:A:GLU:N  | 2        | 111.36        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 6        | 111.29        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 20       | 111.29        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 1        | 111.24        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 9        | 111.24        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 5        | 111.15        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 19       | 110.98        |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1        | 110.98        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 10       | 110.93        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 11       | 110.93        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 7        | 110.93        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 16       | 110.91        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 17       | 110.88        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 11       | 110.82        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 6        | 110.82        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 13       | 110.8         |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 11       | 110.79        |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 3        | 110.78        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 1        | 110.7         |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 15       | 110.65        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 5        | 110.65        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 19       | 110.52        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 20       | 110.52        |
| (1,139) | 1:79:A:ILE:C  | 1:80:A:GLU:N  | 1:80:A:GLU:CA  | 1:80:A:GLU:C  | 7        | 110.5         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 6        | 110.45        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 2        | 110.44        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 4        | 110.44        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 8        | 110.41        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 10       | 110.39        |
| (1,174) | 1:98:A:GLY:C  | 1:99:A:VAL:N  | 1:99:A:VAL:CA  | 1:99:A:VAL:C  | 1        | 110.36        |
| (1,90)  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA | 1:54:A:ARG:C   | 1:55:A:MET:N  | 7        | 110.33        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 11       | 110.21        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 12       | 110.16        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 19       | 110.15        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 18       | 110.14        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 6        | 110.11        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 9        | 110.08        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 8        | 110.07        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 9        | 109.97        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 17       | 109.89        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 13       | 109.86        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 6        | 109.8         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 12       | 109.8         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 9        | 109.8         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 17       | 109.76        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 16       | 109.75        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 16       | 109.74        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 8        | 109.71        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 3        | 109.68        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 14       | 109.63        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 20       | 109.63        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 10       | 109.55        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 18       | 109.54        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 12       | 109.51        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 16       | 109.45        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 8        | 109.41        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 12       | 109.34        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 18       | 109.34        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 3        | 109.32        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1        | 109.29        |
| (1,60)  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA | 1:38:A:THR:C   | 1:39:A:THR:N  | 2        | 109.26        |
| (1,180) | 1:101:A:VAL:C | 1:102:A:ARG:N | 1:102:A:ARG:CA | 1:102:A:ARG:C | 20       | 109.24        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 19       | 109.14        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 5        | 109.05        |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1        | 109.05        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 4        | 109.04        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 9        | 109.03        |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 3        | 109.02        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 8        | 108.98        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 3        | 108.95        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 14       | 108.95        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 17       | 108.91        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 20       | 108.9         |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 17       | 108.88        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 20       | 108.81        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 15       | 108.72        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 12       | 108.71        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 15       | 108.7         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 16       | 108.69        |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 3        | 108.63        |
| (1,163) | 1:92:A:PHE:C  | 1:93:A:LEU:N  | 1:93:A:LEU:CA  | 1:93:A:LEU:C  | 1        | 108.53        |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 3        | 108.53        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 9        | 108.53        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 9        | 108.51        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 5        | 108.47        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 19       | 108.47        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 13       | 108.41        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 19       | 108.39        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 16       | 108.33        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 17       | 108.18        |
| (1,112) | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA | 1:65:A:ASP:C   | 1:66:A:PHE:N  | 3        | 108.15        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 13       | 108.1         |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 1        | 108.08        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 7        | 108.0         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 4        | 107.98        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 7        | 107.95        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 20       | 107.9         |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 12       | 107.88        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 14       | 107.87        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 7        | 107.85        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 12       | 107.75        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 5        | 107.74        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 8        | 107.73        |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1        | 107.71        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 5        | 107.7         |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 8        | 107.68        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 9        | 107.67        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 18       | 107.65        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 4        | 107.63        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 9        | 107.56        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 17       | 107.44        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 10       | 107.32        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 11       | 107.19        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 4        | 107.1         |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 10       | 107.09        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 18       | 107.09        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 3        | 107.07        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 19       | 107.06        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 16       | 107.06        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 6        | 107.0         |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 19       | 106.93        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 7        | 106.88        |
| (1,136) | 1:78:A:ARG:N  | 1:78:A:ARG:CA | 1:78:A:ARG:C   | 1:79:A:ILE:N  | 8        | 106.87        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 5        | 106.85        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 16       | 106.84        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 4        | 106.84        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 15       | 106.61        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 15       | 106.56        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 19       | 106.52        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 19       | 106.51        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 20       | 106.46        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 9        | 106.46        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 5        | 106.37        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 16       | 106.36        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 20       | 106.32        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 17       | 106.31        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 14       | 106.29        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 12       | 106.24        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 18       | 106.19        |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 2        | 106.03        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 10       | 105.97        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 13       | 105.96        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 14       | 105.95        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 14       | 105.85        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 10       | 105.83        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 5        | 105.83        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 16       | 105.76        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 7        | 105.75        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 6        | 105.58        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 14       | 105.54        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 1        | 105.52        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 19       | 105.39        |
| (1,113) | 1:65:A:ASP:C  | 1:66:A:PHE:N  | 1:66:A:PHE:CA  | 1:66:A:PHE:C  | 11       | 105.38        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 14       | 105.35        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 16       | 105.35        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 5        | 105.31        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 8        | 105.24        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 19       | 105.12        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 1        | 105.09        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 11       | 105.05        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 4        | 105.03        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 6        | 105.03        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 3        | 104.98        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 2        | 104.92        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 4        | 104.9         |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 12       | 104.85        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 18       | 104.83        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 11       | 104.8         |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 13       | 104.79        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 20       | 104.78        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 18       | 104.7         |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 2        | 104.7         |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 3        | 104.7         |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 15       | 104.66        |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 2        | 104.58        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 7        | 104.56        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 18       | 104.56        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 8        | 104.53        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 18       | 104.51        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 20       | 104.39        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 8        | 104.36        |
| (1,149) | 1:85:A:ASP:C  | 1:86:A:ARG:N  | 1:86:A:ARG:CA  | 1:86:A:ARG:C  | 2        | 104.28        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 19       | 104.28        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 4        | 104.23        |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 11       | 104.21        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 7        | 104.16        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 8        | 104.0         |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 18       | 103.99        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 13       | 103.94        |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 2        | 103.93        |
| (1,157) | 1:89:A:LYS:C  | 1:90:A:VAL:N  | 1:90:A:VAL:CA  | 1:90:A:VAL:C  | 7        | 103.9         |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 2        | 103.9         |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 8        | 103.7         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 15       | 103.67        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 8        | 103.66        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 9        | 103.63        |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 3        | 103.57        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 1        | 103.56        |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 2        | 103.54        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 16       | 103.5         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 7        | 103.47        |
| (1,111) | 1:64:A:PHE:C  | 1:65:A:ASP:N  | 1:65:A:ASP:CA  | 1:65:A:ASP:C  | 11       | 103.46        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 12       | 103.45        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 13       | 103.41        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 14       | 103.36        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 17       | 103.33        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 9        | 103.07        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 5        | 102.92        |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 14       | 102.89        |
| (1,178) | 1:100:A:THR:C | 1:101:A:VAL:N | 1:101:A:VAL:CA | 1:101:A:VAL:C | 2        | 102.77        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 15       | 102.65        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 12       | 102.64        |
| (1,3)   | 1:2:A:ASN:C   | 1:3:A:ILE:N   | 1:3:A:ILE:CA   | 1:3:A:ILE:C   | 15       | 102.53        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 20       | 102.45        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 12       | 102.36        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 16       | 102.16        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 14       | 102.14        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 5        | 102.12        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 3        | 102.07        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 17       | 102.02        |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 8        | 102.02        |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 10       | 102.01        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 6        | 101.88        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 1        | 101.79        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 11       | 101.65        |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 1        | 101.56        |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 19       | 101.43        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 18       | 101.4         |
| (1,89)  | 1:53:A:SER:C  | 1:54:A:ARG:N  | 1:54:A:ARG:CA  | 1:54:A:ARG:C  | 14       | 101.36        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 13       | 101.35        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 9        | 101.33        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 13       | 101.31        |
| (1,91)  | 1:54:A:ARG:C  | 1:55:A:MET:N  | 1:55:A:MET:CA  | 1:55:A:MET:C  | 2        | 101.24        |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 8        | 101.06        |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 6        | 100.93        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 18       | 100.89        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 17       | 100.82        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 16       | 100.77        |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 11       | 100.76        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 12       | 100.75        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 10       | 100.66        |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 11       | 100.63        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 4        | 100.5         |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 10       | 100.47        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 16       | 100.28        |
| (1,130) | 1:74:A:VAL:N  | 1:74:A:VAL:CA | 1:74:A:VAL:C   | 1:75:A:GLU:N  | 10       | 100.23        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 13       | 100.17        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 7        | 100.17        |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 2        | 100.08        |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 11       | 100.02        |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 17       | 99.91         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 6        | 99.84         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 18       | 99.78         |
| (1,167) | 1:94:A:GLU:C  | 1:95:A:ALA:N  | 1:95:A:ALA:CA  | 1:95:A:ALA:C  | 17       | 99.76         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 7        | 99.61         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 20       | 99.6          |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 14       | 99.35         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 19       | 99.23         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 9        | 99.2          |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 6        | 99.1          |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 5        | 99.01         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 3        | 98.84         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 10       | 98.8          |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 15       | 98.69         |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 1        | 98.65         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 11       | 98.62         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 19       | 98.48         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 17       | 98.38         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 15       | 98.25         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 15       | 98.24         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 17       | 98.02         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 10       | 97.98         |
| (1,13)  | 1:7:A:THR:C   | 1:8:A:THR:N   | 1:8:A:THR:CA   | 1:8:A:THR:C   | 2        | 97.86         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 13       | 97.81         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 15       | 97.64         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 4        | 97.59         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 9        | 97.59         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 3        | 97.5          |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 10       | 97.5          |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 3        | 97.36         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 7        | 97.36         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 17       | 97.36         |
| (1,123) | 1:70:A:TYR:C  | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 2        | 97.35         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 2        | 97.31         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 16       | 97.3          |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 12       | 97.29         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 14       | 97.12         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 13       | 97.1          |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 14       | 97.07         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 3        | 97.07         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 4        | 97.06         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 8        | 97.05         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 1        | 97.03         |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 20       | 97.02         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 2        | 96.82         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 4        | 96.69         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 18       | 96.69         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 7        | 96.6          |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 6        | 96.44         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 8        | 96.43         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 16       | 96.43         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 4        | 96.42         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 19       | 96.35         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 12       | 96.34         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 5        | 96.33         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 13       | 96.29         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 19       | 96.23         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 12       | 96.2          |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 7        | 96.01         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 2        | 95.96         |
| (1,146) | 1:83:A:PHE:N  | 1:83:A:PHE:CA | 1:83:A:PHE:C   | 1:84:A:GLY:N  | 15       | 95.82         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 5        | 95.73         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 6        | 95.65         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 4        | 95.65         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 18       | 95.63         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 18       | 95.6          |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 10       | 95.58         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 5        | 95.55         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 9        | 95.49         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 1        | 95.38         |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 11       | 95.17         |
| (1,176) | 1:99:A:VAL:C  | 1:100:A:THR:N | 1:100:A:THR:CA | 1:100:A:THR:C | 9        | 95.1          |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 9        | 95.09         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 17       | 94.9          |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 20       | 94.83         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 3        | 94.69         |
| (1,170) | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1        | 94.55         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 19       | 94.55         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 16       | 94.52         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 18       | 94.39         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 20       | 94.39         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 12       | 94.08         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 3        | 93.96         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 6        | 93.95         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 11       | 93.83         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 20       | 93.8          |
| (1,81)  | 1:49:A:GLY:C  | 1:50:A:ALA:N  | 1:50:A:ALA:CA  | 1:50:A:ALA:C  | 10       | 93.07         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 14       | 92.96         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 15       | 92.77         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 11       | 92.72         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 18       | 92.59         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 10       | 92.38         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 15       | 92.36         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 14       | 92.36         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 2        | 92.27         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 5        | 92.25         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 20       | 92.24         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 3        | 92.0          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 5        | 91.98         |
| (1,70)  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA | 1:44:A:ASP:C   | 1:45:A:LEU:N  | 3        | 91.89         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 19       | 91.86         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 14       | 91.85         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 12       | 91.83         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 16       | 91.76         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 12       | 91.69         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 7        | 91.57         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 14       | 91.56         |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 11       | 91.56         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 16       | 91.49         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 3        | 91.45         |
| (1,57)  | 1:36:A:TRP:C  | 1:37:A:HIS:N  | 1:37:A:HIS:CA  | 1:37:A:HIS:C  | 2        | 91.39         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 2        | 91.17         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1        | 91.14         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 19       | 91.07         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 8        | 91.06         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 13       | 90.98         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 17       | 90.8          |
| (1,34)  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1:22:A:THR:CA  | 1:22:A:THR:C  | 16       | 90.74         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 15       | 90.45         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 15       | 90.09         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 17       | 89.85         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 20       | 89.7          |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 2        | 89.6          |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 14       | 89.54         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 6        | 88.93         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1        | 88.92         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 19       | 88.85         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 11       | 88.69         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 4        | 88.68         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1        | 88.54         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 2        | 88.25         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 15       | 88.25         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 13       | 88.16         |
| (1,1)   | 1:1:A:MET:C   | 1:2:A:ASN:N   | 1:2:A:ASN:CA   | 1:2:A:ASN:C   | 2        | 88.11         |
| (1,69)  | 1:43:A:VAL:C  | 1:44:A:ASP:N  | 1:44:A:ASP:CA  | 1:44:A:ASP:C  | 11       | 88.05         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 9        | 88.04         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 16       | 88.03         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 8        | 88.03         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 4        | 87.93         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 9        | 87.82         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 10       | 87.74         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 8        | 87.69         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 10       | 87.68         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 9        | 87.67         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 4        | 87.63         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 14       | 87.59         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 7        | 87.57         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 5        | 87.55         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 7        | 87.54         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 3        | 87.51         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 4        | 87.48         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 20       | 87.35         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 14       | 87.24         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 8        | 87.23         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 9        | 87.18         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 7        | 87.13         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 13       | 87.04         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 20       | 87.01         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 2        | 87.01         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 19       | 86.98         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 6        | 86.93         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 17       | 86.8          |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 11       | 86.6          |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 15       | 86.5          |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 5        | 86.14         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 2        | 86.08         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 12       | 86.06         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 16       | 86.01         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 8        | 85.96         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 2        | 85.94         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 3        | 85.89         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 6        | 85.89         |
| (1,241) | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 6        | 85.87         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 12       | 85.74         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 17       | 85.74         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 16       | 85.59         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 18       | 85.57         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 12       | 85.57         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 5        | 85.53         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 4        | 85.5          |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 13       | 85.45         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 1        | 85.25         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 5        | 85.19         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 13       | 85.14         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 16       | 85.05         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 18       | 85.04         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 5        | 85.03         |
| (1,55)  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1        | 85.03         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 4        | 84.88         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 15       | 84.87         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 10       | 84.84         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 13       | 84.82         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 12       | 84.71         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 7        | 84.7          |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 3        | 84.67         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 20       | 84.66         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 12       | 84.49         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 8        | 84.45         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 15       | 84.33         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 10       | 84.32         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 16       | 83.94         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 14       | 83.9          |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 19       | 83.88         |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 3        | 83.85         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 9        | 83.84         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 7        | 83.79         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 10       | 83.79         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 8        | 83.76         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 12       | 83.67         |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 2        | 83.67         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 17       | 83.6          |
| (1,59)  | 1:37:A:HIS:C  | 1:38:A:THR:N  | 1:38:A:THR:CA  | 1:38:A:THR:C  | 1        | 83.28         |
| (1,77)  | 1:47:A:GLU:C  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 6        | 83.26         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 18       | 83.25         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 19       | 83.17         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 10       | 83.04         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 17       | 83.0          |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 11       | 83.0          |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 20       | 82.89         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 8        | 82.89         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 5        | 82.87         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 18       | 82.74         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 14       | 82.73         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 11       | 82.64         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 7        | 82.48         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 7        | 82.43         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 17       | 82.34         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 2        | 82.26         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 2        | 82.11         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 20       | 82.1          |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 14       | 82.07         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 10       | 82.05         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 17       | 81.99         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 1        | 81.89         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 5        | 81.83         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 13       | 81.74         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 12       | 81.74         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 13       | 81.73         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 11       | 81.59         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 15       | 81.58         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 5        | 81.54         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 15       | 81.43         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 4        | 81.38         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 11       | 81.38         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 16       | 81.31         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 17       | 81.31         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 6        | 81.3          |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 2        | 81.28         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 12       | 81.24         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 18       | 81.19         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 6        | 81.18         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 16       | 81.18         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 2        | 81.09         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 15       | 80.94         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 6        | 80.91         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 18       | 80.88         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 12       | 80.83         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 11       | 80.73         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 13       | 80.69         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 19       | 80.67         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 5        | 80.53         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 10       | 80.46         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 3        | 80.44         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 3        | 80.4          |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 13       | 80.4          |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 10       | 80.36         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 15       | 80.35         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 8        | 80.21         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 9        | 80.2          |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 17       | 80.19         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 7        | 80.15         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 11       | 80.09         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 14       | 80.09         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 7        | 80.03         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 1        | 80.0          |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 13       | 79.91         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 4        | 79.83         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 20       | 79.81         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 11       | 79.76         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 17       | 79.76         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 8        | 79.68         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 4        | 79.58         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 14       | 79.53         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 2        | 79.51         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 8        | 79.48         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 16       | 79.4          |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 7        | 79.35         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 14       | 79.29         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 19       | 79.28         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 9        | 79.17         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 4        | 79.05         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 20       | 79.04         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 9        | 79.0          |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 5        | 78.84         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 20       | 78.81         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1        | 78.76         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 3        | 78.72         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 3        | 78.57         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 13       | 78.51         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 19       | 78.49         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 20       | 78.47         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 6        | 78.43         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 6        | 78.42         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 4        | 78.39         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 7        | 78.38         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 15       | 78.27         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 9        | 78.21         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 10       | 78.16         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 11       | 78.15         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 9        | 78.06         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 5        | 78.04         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 12       | 77.96         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 8        | 77.95         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 18       | 77.92         |
| (1,103) | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 10       | 77.85         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 17       | 77.83         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 12       | 77.73         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 15       | 77.63         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 18       | 77.63         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 13       | 77.63         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 1        | 77.56         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 19       | 77.55         |
| (1,71)  | 1:44:A:ASP:C  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA  | 1:45:A:LEU:C  | 7        | 77.44         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 4        | 77.43         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 9        | 77.39         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 19       | 77.38         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 19       | 77.32         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 15       | 77.11         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 11       | 77.08         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 13       | 76.99         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 18       | 76.95         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 16       | 76.88         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 16       | 76.87         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 14       | 76.73         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 13       | 76.71         |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 11       | 76.69         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 19       | 76.66         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 18       | 76.61         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 15       | 76.58         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 12       | 76.51         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 15       | 76.41         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 14       | 76.4          |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 17       | 76.2          |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 3        | 76.13         |
| (1,99)  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 15       | 76.06         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 18       | 76.04         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 12       | 76.03         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 20       | 76.02         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 11       | 75.79         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 18       | 75.75         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 19       | 75.71         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 17       | 75.71         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 15       | 75.44         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 17       | 75.34         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 12       | 75.32         |
| (1,165) | 1:93:A:LEU:C  | 1:94:A:GLU:N  | 1:94:A:GLU:CA  | 1:94:A:GLU:C  | 13       | 75.28         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 12       | 75.24         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 16       | 75.04         |
| (1,47)  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 20       | 74.96         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 10       | 74.74         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 7        | 74.72         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 14       | 74.66         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1        | 74.64         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 3        | 74.46         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 2        | 74.4          |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 8        | 74.29         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 6        | 74.0          |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 9        | 73.87         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 14       | 73.79         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 5        | 73.77         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 4        | 73.74         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 8        | 73.74         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 10       | 73.71         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 11       | 73.62         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 18       | 73.57         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 15       | 73.53         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 19       | 73.53         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 8        | 73.51         |
| (1,72)  | 1:45:A:LEU:N  | 1:45:A:LEU:CA | 1:45:A:LEU:C   | 1:46:A:ARG:N  | 1        | 73.47         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 9        | 73.43         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 10       | 73.4          |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 10       | 73.38         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 16       | 73.26         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 5        | 73.23         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 6        | 73.11         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 5        | 73.06         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 19       | 73.05         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 5        | 72.98         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 6        | 72.9          |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ALA:N  | 1:57:A:ALA:CA  | 1:57:A:ALA:C  | 16       | 72.87         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 20       | 72.87         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 10       | 72.78         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1        | 72.77         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 9        | 72.64         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 6        | 72.62         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 13       | 72.61         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 7        | 72.6          |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 19       | 72.47         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 16       | 72.47         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 5        | 72.46         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 1        | 72.4          |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 8        | 72.4          |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 11       | 72.37         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 8        | 72.35         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 18       | 72.3          |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 4        | 72.27         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 8        | 72.18         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 6        | 72.08         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 5        | 72.05         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 5        | 72.04         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 9        | 72.04         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 4        | 72.03         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 18       | 72.02         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 10       | 72.01         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 20       | 72.0          |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 7        | 72.0          |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 4        | 71.99         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 3        | 71.95         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 3        | 71.9          |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 16       | 71.89         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 18       | 71.89         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 8        | 71.84         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 7        | 71.83         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 9        | 71.8          |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 5        | 71.8          |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 10       | 71.79         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 6        | 71.79         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 12       | 71.77         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 5        | 71.74         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 15       | 71.74         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 20       | 71.74         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 9        | 71.71         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 4        | 71.66         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 6        | 71.63         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 4        | 71.62         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 17       | 71.61         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 4        | 71.6          |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 14       | 71.53         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 14       | 71.51         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 9        | 71.45         |
| (1,188) | 1:105:A:PHE:C | 1:106:A:VAL:N | 1:106:A:VAL:CA | 1:106:A:VAL:C | 3        | 71.4          |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 10       | 71.39         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 9        | 71.34         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 11       | 71.25         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 20       | 71.23         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 16       | 71.19         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 19       | 71.16         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 19       | 71.16         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 11       | 71.15         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 7        | 71.12         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 18       | 71.03         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 10       | 71.01         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 9        | 71.0          |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 17       | 70.99         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 6        | 70.96         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 12       | 70.94         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 8        | 70.92         |
| (1,53)  | 1:33:A:SER:C  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 8        | 70.8          |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 8        | 70.66         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 9        | 70.66         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 16       | 70.64         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 17       | 70.62         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 13       | 70.57         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 18       | 70.55         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 13       | 70.48         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 4        | 70.46         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 9        | 70.46         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 2        | 70.41         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 10       | 70.35         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 7        | 70.35         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 12       | 70.34         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 2        | 70.3          |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 16       | 70.15         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 5        | 70.15         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 6        | 70.14         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 5        | 70.08         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 2        | 70.08         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 10       | 70.02         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 14       | 69.99         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 13       | 69.97         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 7        | 69.95         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 4        | 69.92         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 6        | 69.88         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 4        | 69.79         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 18       | 69.77         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 17       | 69.76         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 10       | 69.76         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 19       | 69.71         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 15       | 69.61         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 8        | 69.6          |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 8        | 69.58         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 13       | 69.58         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 7        | 69.56         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 6        | 69.5          |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 9        | 69.5          |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1        | 69.47         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 13       | 69.4          |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 8        | 69.39         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 10       | 69.37         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 7        | 69.32         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1        | 69.31         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 3        | 69.29         |
| (1,194) | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 20       | 69.29         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 18       | 69.26         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 19       | 69.26         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 6        | 69.22         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 6        | 69.2          |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 9        | 69.18         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 4        | 68.99         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 8        | 68.94         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 3        | 68.9          |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1        | 68.88         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 11       | 68.88         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 10       | 68.86         |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 3        | 68.83         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 17       | 68.82         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 6        | 68.76         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 14       | 68.76         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 4        | 68.56         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 16       | 68.53         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 5        | 68.52         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 8        | 68.51         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 13       | 68.51         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 7        | 68.49         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1        | 68.48         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 8        | 68.48         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 5        | 68.44         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 9        | 68.43         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 3        | 68.43         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 12       | 68.42         |
| (1,39)  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 7        | 68.39         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 2        | 68.38         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 7        | 68.37         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 2        | 68.35         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 6        | 68.32         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 9        | 68.28         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 13       | 68.25         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 11       | 68.25         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 12       | 68.23         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 5        | 68.22         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 18       | 68.22         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 10       | 68.21         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 10       | 68.2          |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 18       | 68.16         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 8        | 68.14         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 2        | 68.12         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 4        | 68.09         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 4        | 68.08         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 2        | 68.04         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 14       | 68.03         |
| (1,121) | 1:69:A:THR:C  | 1:70:A:TYR:N  | 1:70:A:TYR:CA  | 1:70:A:TYR:C  | 2        | 68.01         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 18       | 68.01         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 8        | 67.9          |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 4        | 67.85         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 9        | 67.74         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 17       | 67.7          |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 20       | 67.68         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 13       | 67.56         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 14       | 67.56         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 18       | 67.54         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 20       | 67.52         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 17       | 67.5          |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 2        | 67.49         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 2        | 67.46         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 7        | 67.39         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 2        | 67.39         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 18       | 67.37         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 5        | 67.29         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 20       | 67.23         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 13       | 67.21         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 15       | 67.16         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 4        | 67.12         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 14       | 67.1          |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 8        | 67.09         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 19       | 66.99         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 19       | 66.95         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 10       | 66.95         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 7        | 66.95         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 4        | 66.94         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 4        | 66.87         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 5        | 66.77         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 6        | 66.77         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 9        | 66.77         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 2        | 66.77         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 17       | 66.75         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 7        | 66.74         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 10       | 66.74         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 17       | 66.73         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 20       | 66.72         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 13       | 66.68         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1        | 66.66         |
| (1,101) | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 17       | 66.64         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 9        | 66.61         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 11       | 66.59         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 3        | 66.51         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 4        | 66.47         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 15       | 66.45         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 6        | 66.41         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 15       | 66.37         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 2        | 66.34         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 2        | 66.32         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 13       | 66.31         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 11       | 66.28         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 6        | 66.26         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 15       | 66.24         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 15       | 66.23         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 20       | 66.21         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 11       | 66.18         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 12       | 66.18         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 19       | 66.17         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 10       | 66.15         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 12       | 66.13         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 15       | 66.12         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 7        | 66.1          |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 7        | 66.09         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 18       | 66.09         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 17       | 66.08         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 19       | 66.07         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 8        | 66.06         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 4        | 66.02         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 16       | 66.02         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 9        | 66.0          |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1        | 66.0          |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 11       | 65.99         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 5        | 65.98         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 11       | 65.98         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 7        | 65.96         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 6        | 65.95         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 15       | 65.94         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 14       | 65.9          |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 9        | 65.81         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 10       | 65.81         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 1        | 65.8          |
| (1,239) | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 13       | 65.79         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 18       | 65.78         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 8        | 65.74         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 20       | 65.73         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 5        | 65.69         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 3        | 65.68         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1        | 65.65         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 18       | 65.64         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 20       | 65.63         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1        | 65.55         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 14       | 65.54         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 5        | 65.52         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 3        | 65.5          |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 11       | 65.45         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 20       | 65.41         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 20       | 65.4          |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 12       | 65.37         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 3        | 65.32         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 1        | 65.3          |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1        | 65.29         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 7        | 65.2          |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 19       | 65.19         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 14       | 65.17         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 12       | 65.17         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 14       | 65.16         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 14       | 65.15         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 9        | 65.14         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 14       | 65.13         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 15       | 65.11         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 2        | 65.08         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 14       | 65.07         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 2        | 65.06         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 11       | 65.06         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 15       | 65.06         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 5        | 64.95         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 13       | 64.92         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 20       | 64.88         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 5        | 64.87         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 14       | 64.87         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 16       | 64.87         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 9        | 64.85         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 19       | 64.84         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 6        | 64.81         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 12       | 64.79         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 16       | 64.78         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 13       | 64.74         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 7        | 64.72         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 9        | 64.7          |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 3        | 64.7          |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 18       | 64.68         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 8        | 64.67         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 20       | 64.66         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 20       | 64.65         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 8        | 64.62         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1        | 64.62         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 17       | 64.61         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 6        | 64.59         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 12       | 64.58         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 19       | 64.55         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 3        | 64.53         |
| (1,79)  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1:49:A:GLY:CA  | 1:49:A:GLY:C  | 15       | 64.53         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 2        | 64.52         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 16       | 64.43         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 20       | 64.42         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 16       | 64.41         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 10       | 64.4          |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 13       | 64.39         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 16       | 64.39         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 11       | 64.39         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 18       | 64.39         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 6        | 64.38         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 13       | 64.36         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 4        | 64.33         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 19       | 64.32         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 17       | 64.31         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 17       | 64.3          |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 6        | 64.25         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 11       | 64.24         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 7        | 64.23         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 3        | 64.22         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 3        | 64.2          |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 17       | 64.2          |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 19       | 64.18         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 8        | 64.17         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 16       | 64.16         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 9        | 64.15         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 4        | 64.11         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 7        | 64.1          |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 10       | 64.08         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 3        | 64.08         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 6        | 64.08         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 11       | 64.07         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 15       | 64.06         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 14       | 64.03         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 12       | 64.02         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 7        | 63.98         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 2        | 63.96         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1        | 63.95         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 10       | 63.92         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 13       | 63.92         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 13       | 63.91         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 11       | 63.9          |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 7        | 63.88         |
| (1,30)  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 19       | 63.88         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 15       | 63.87         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1        | 63.86         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 6        | 63.84         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 18       | 63.84         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 20       | 63.82         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 8        | 63.8          |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 10       | 63.79         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 16       | 63.78         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 17       | 63.77         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 8        | 63.77         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 7        | 63.75         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 20       | 63.73         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 20       | 63.72         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 4        | 63.71         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 9        | 63.71         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 6        | 63.7          |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1        | 63.69         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 3        | 63.69         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1        | 63.68         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 2        | 63.68         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 19       | 63.67         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 16       | 63.66         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 3        | 63.66         |
| (1,221) | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1        | 63.64         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 17       | 63.62         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 10       | 63.6          |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 19       | 63.59         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 19       | 63.59         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 5        | 63.58         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1        | 63.57         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 6        | 63.57         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 12       | 63.57         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 7        | 63.57         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 13       | 63.56         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 15       | 63.55         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 4        | 63.53         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 2        | 63.53         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 16       | 63.53         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 14       | 63.53         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 9        | 63.53         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 10       | 63.52         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 14       | 63.52         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1        | 63.52         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 18       | 63.51         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 11       | 63.51         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 10       | 63.51         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 7        | 63.5          |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 6        | 63.5          |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 20       | 63.5          |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 19       | 63.5          |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 11       | 63.5          |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 7        | 63.5          |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 12       | 63.49         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 5        | 63.49         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 8        | 63.48         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 11       | 63.48         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 6        | 63.48         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 13       | 63.47         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 19       | 63.46         |
| (1,205) | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 5        | 63.44         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 12       | 63.44         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 17       | 63.43         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 3        | 63.42         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 9        | 63.42         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 7        | 63.41         |
| (1,209) | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 15       | 63.4          |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 16       | 63.4          |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 5        | 63.39         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 6        | 63.38         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 16       | 63.37         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 2        | 63.37         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 14       | 63.36         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 12       | 63.35         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 11       | 63.35         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 10       | 63.35         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 3        | 63.33         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 3        | 63.32         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 13       | 63.32         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 4        | 63.31         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 12       | 63.3          |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 19       | 63.3          |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 12       | 63.3          |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 2        | 63.29         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1        | 63.28         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 16       | 63.28         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 2        | 63.27         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1        | 63.26         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 16       | 63.23         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 12       | 63.23         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 18       | 63.22         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 9        | 63.22         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 15       | 63.22         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 5        | 63.21         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 3        | 63.21         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 6        | 63.2          |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 12       | 63.18         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 9        | 63.17         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 17       | 63.16         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 14       | 63.13         |
| (1,45)  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1        | 63.13         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 20       | 63.11         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 3        | 63.07         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 16       | 63.06         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 19       | 63.0          |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 18       | 63.0          |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 9        | 62.99         |
| (1,213) | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 17       | 62.96         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 5        | 62.94         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 15       | 62.93         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 14       | 62.93         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 19       | 62.9          |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 10       | 62.88         |
| (1,22)  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 9        | 62.86         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 5        | 62.85         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 19       | 62.83         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1        | 62.79         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 17       | 62.79         |
| (1,28)  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 8        | 62.78         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 4        | 62.7          |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 4        | 62.68         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 9        | 62.67         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 19       | 62.67         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 15       | 62.66         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 7        | 62.66         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 8        | 62.65         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 2        | 62.6          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1        | 62.55         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 17       | 62.55         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 11       | 62.52         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 7        | 62.47         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 5        | 62.46         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1        | 62.46         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 4        | 62.43         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 5        | 62.42         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 2        | 62.37         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 10       | 62.37         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 3        | 62.37         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 11       | 62.36         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 8        | 62.36         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 18       | 62.34         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 10       | 62.33         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 5        | 62.32         |
| (1,203) | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 18       | 62.28         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 11       | 62.28         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 12       | 62.26         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 16       | 62.24         |
| (1,225) | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 2        | 62.2          |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 18       | 62.2          |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 16       | 62.19         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 12       | 62.18         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 3        | 62.18         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 17       | 62.17         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 17       | 62.13         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 18       | 62.12         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 8        | 62.1          |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 16       | 62.09         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 16       | 62.09         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 14       | 62.06         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 5        | 62.05         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 16       | 62.04         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 20       | 62.02         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 15       | 61.99         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 9        | 61.99         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 2        | 61.89         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 14       | 61.89         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 9        | 61.86         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 15       | 61.86         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 14       | 61.84         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 14       | 61.84         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 16       | 61.84         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 5        | 61.82         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 18       | 61.78         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 12       | 61.77         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1        | 61.76         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 11       | 61.76         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 14       | 61.75         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 5        | 61.75         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 16       | 61.75         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 4        | 61.75         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 20       | 61.72         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 16       | 61.71         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 17       | 61.69         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 7        | 61.68         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 15       | 61.66         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 2        | 61.66         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 5        | 61.63         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 3        | 61.62         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 7        | 61.62         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 16       | 61.61         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 16       | 61.57         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 18       | 61.57         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 13       | 61.56         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 4        | 61.55         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 7        | 61.52         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 10       | 61.5          |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 14       | 61.49         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 7        | 61.48         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 4        | 61.45         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 6        | 61.44         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1        | 61.43         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 18       | 61.39         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 6        | 61.38         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 13       | 61.36         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 15       | 61.35         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 17       | 61.32         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 17       | 61.31         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 10       | 61.3          |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 10       | 61.28         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 15       | 61.26         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1        | 61.25         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 8        | 61.21         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 10       | 61.21         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 17       | 61.21         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 10       | 61.2          |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 13       | 61.19         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 3        | 61.19         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 12       | 61.18         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 15       | 61.16         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 14       | 61.16         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 19       | 61.12         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 4        | 61.11         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 3        | 61.09         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 4        | 61.09         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 9        | 61.07         |
| (1,223) | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 6        | 61.04         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 19       | 61.02         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1        | 61.02         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 12       | 60.98         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 4        | 60.96         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 12       | 60.93         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 20       | 60.91         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 11       | 60.9          |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 12       | 60.89         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 15       | 60.88         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 15       | 60.87         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 20       | 60.86         |
| (1,219) | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 18       | 60.85         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 4        | 60.85         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 13       | 60.83         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 11       | 60.81         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 8        | 60.81         |
| (1,24)  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 11       | 60.81         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 2        | 60.77         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 20       | 60.75         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 12       | 60.75         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 16       | 60.72         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 12       | 60.71         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 12       | 60.65         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 12       | 60.64         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 3        | 60.63         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 7        | 60.63         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 2        | 60.62         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 17       | 60.61         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 14       | 60.59         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 12       | 60.59         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 17       | 60.58         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 10       | 60.56         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 14       | 60.54         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 12       | 60.52         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 9        | 60.51         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 16       | 60.49         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 13       | 60.49         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 11       | 60.48         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 16       | 60.48         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 5        | 60.48         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 20       | 60.46         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 3        | 60.45         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 13       | 60.44         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 16       | 60.43         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 11       | 60.41         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 17       | 60.38         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 20       | 60.38         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 11       | 60.37         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 17       | 60.34         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 17       | 60.32         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 20       | 60.31         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 11       | 60.29         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 12       | 60.27         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 8        | 60.26         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 20       | 60.25         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 14       | 60.24         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 19       | 60.21         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 8        | 60.16         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 20       | 60.05         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 6        | 60.05         |
| (1,211) | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 6        | 60.04         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 6        | 60.02         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 4        | 60.02         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 14       | 60.01         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 17       | 60.01         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 11       | 60.0          |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 19       | 60.0          |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 19       | 59.98         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 7        | 59.98         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1        | 59.97         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 13       | 59.96         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 17       | 59.96         |
| (1,215) | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 14       | 59.9          |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 5        | 59.9          |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 8        | 59.9          |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 15       | 59.84         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 20       | 59.77         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 15       | 59.75         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 20       | 59.74         |
| (1,20)  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 13       | 59.7          |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 11       | 59.68         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 5        | 59.67         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 3        | 59.67         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 13       | 59.63         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 14       | 59.61         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 18       | 59.59         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 4        | 59.52         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 14       | 59.51         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 6        | 59.48         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 14       | 59.43         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 20       | 59.38         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 15       | 59.33         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 16       | 59.29         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 16       | 59.29         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 13       | 59.28         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 13       | 59.23         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 18       | 59.21         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 12       | 59.17         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 1        | 59.11         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 6        | 59.09         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 11       | 59.07         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 8        | 59.06         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 11       | 59.05         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 6        | 59.02         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 15       | 59.0          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 15       | 58.97         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 15       | 58.95         |
| (1,192) | 1:108:A:GLU:C | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 2        | 58.87         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 16       | 58.86         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 17       | 58.86         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 2        | 58.85         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 20       | 58.84         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 8        | 58.83         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 6        | 58.82         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 13       | 58.81         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 19       | 58.78         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 9        | 58.78         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 18       | 58.74         |
| (1,235) | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1        | 58.73         |
| (1,37)  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 19       | 58.69         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 17       | 58.58         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 4        | 58.57         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 19       | 58.56         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 18       | 58.5          |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 4        | 58.48         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 11       | 58.46         |
| (1,190) | 1:106:A:VAL:C | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 2        | 58.42         |
| (1,217) | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 16       | 58.41         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 4        | 58.39         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 11       | 58.31         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 10       | 58.3          |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 17       | 58.29         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1        | 58.28         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 8        | 58.18         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 19       | 58.17         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 13       | 58.17         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 9        | 58.15         |
| (1,26)  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 13       | 58.15         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1        | 58.14         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1        | 58.12         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 12       | 58.09         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 20       | 58.01         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 14       | 57.96         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 18       | 57.95         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 18       | 57.93         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 12       | 57.92         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 9        | 57.83         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 11       | 57.78         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 2        | 57.74         |
| (1,233) | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 3        | 57.65         |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N  | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 20       | 57.5          |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 3        | 57.45         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 6        | 57.36         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 15       | 57.36         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1        | 57.31         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 2        | 57.31         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 15       | 57.28         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 10       | 57.28         |
| (1,201) | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 8        | 57.19         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 19       | 57.15         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 10       | 57.09         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 7        | 56.94         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 5        | 56.91         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 18       | 56.9          |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 14       | 56.85         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 12       | 56.83         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 10       | 56.82         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 2        | 56.81         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 8        | 56.8          |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 16       | 56.77         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 7        | 56.74         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 11       | 56.67         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 5        | 56.66         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 5        | 56.57         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 4        | 56.57         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 4        | 56.5          |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 13       | 56.5          |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 20       | 56.46         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 10       | 56.42         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 7        | 56.41         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 9        | 56.36         |
| (1,147) | 1:83:A:PHE:C  | 1:84:A:GLY:N  | 1:84:A:GLY:CA  | 1:84:A:GLY:C  | 5        | 56.34         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 15       | 56.34         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 20       | 56.31         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 20       | 56.28         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 12       | 56.26         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 13       | 56.23         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 15       | 56.22         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 19       | 56.21         |
| (1,97)  | 1:57:A:ALA:C  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 19       | 56.07         |
| (1,41)  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 2        | 56.04         |
| (1,75)  | 1:46:A:ARG:C  | 1:47:A:GLU:N  | 1:47:A:GLU:CA  | 1:47:A:GLU:C  | 3        | 55.98         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 3        | 55.97         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 13       | 55.94         |
| (1,227) | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 10       | 55.84         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C   | 1:77:A:LYS:N  | 2        | 55.81         |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 14       | 55.8          |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 11       | 55.8          |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 20       | 55.8          |
| (1,229) | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 3        | 55.77         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 6        | 55.73         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 14       | 55.69         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 17       | 55.66         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 13       | 55.65         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1        | 55.63         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 9        | 55.62         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 3        | 55.6          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 15       | 55.59         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N   | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 16       | 55.59         |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N  | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 18       | 55.46         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 4        | 55.44         |
| (1,18)  | 1:12:A:PRO:C  | 1:13:A:VAL:N   | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 3        | 55.43         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C   | 1:36:A:TRP:N  | 15       | 55.33         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 9        | 55.31         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N   | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 7        | 55.27         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N   | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 8        | 55.2          |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 17       | 55.1          |
| (1,51)  | 1:32:A:ALA:C  | 1:33:A:SER:N   | 1:33:A:SER:CA  | 1:33:A:SER:C  | 14       | 55.0          |
| (1,207) | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N  | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 19       | 54.89         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 19       | 54.88         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N  | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 4        | 54.86         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N  | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 8        | 54.82         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 18       | 54.68         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N  | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 7        | 54.67         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N  | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 10       | 54.67         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 10       | 54.44         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N   | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 6        | 54.43         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N   | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 18       | 54.27         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 7        | 54.25         |
| (1,231) | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N  | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 18       | 54.17         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 4        | 54.16         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 2        | 53.53         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C  | 1:131:A:VAL:N | 4        | 53.51         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 13       | 53.48         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C  | 1:131:A:VAL:N | 7        | 53.47         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C   | 1:36:A:TRP:N  | 19       | 53.44         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA  | 1:20:A:TYR:C  | 18       | 53.43         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 17       | 53.21         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C   | 1:22:A:THR:N  | 13       | 53.16         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C  | 1:131:A:VAL:N | 8        | 53.12         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 13       | 52.97         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C  | 1:131:A:VAL:N | 10       | 52.9          |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA  | 1:30:A:ASN:C  | 9        | 52.81         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C   | 1:36:A:TRP:N  | 11       | 52.71         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 2        | 52.47         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C   | 1:77:A:LYS:N  | 15       | 52.39         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 17       | 52.31         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 6        | 52.27         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C  | 1:129:A:ARG:N | 7        | 52.25         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C  | 1:131:A:VAL:N | 6        | 52.14         |
| (1,199) | 1:112:A:PRO:C | 1:113:A:VAL:N  | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 8        | 51.85         |
| (1,43)  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N   | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 19       | 51.8          |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N  | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 9        | 51.75         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 12       | 51.5          |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C   | 1:36:A:TRP:N  | 14       | 51.41         |
| (1,237) | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N  | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 5        | 51.38         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C   | 1:62:A:MET:N  | 2        | 51.23         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C  | 1:129:A:ARG:N | 10       | 51.08         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 6        | 50.98         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 1        | 50.83         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 13       | 50.44         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 18       | 50.37         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 8        | 50.35         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 12       | 50.25         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 5        | 50.04         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 8        | 50.02         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 17       | 49.98         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA | 1:20:A:TYR:C  | 8        | 49.92         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA | 1:20:A:TYR:C  | 5        | 49.7          |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 5        | 49.65         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 4        | 49.62         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA | 1:20:A:TYR:C  | 7        | 49.59         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 7        | 49.51         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 12       | 49.42         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 5        | 49.37         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 15       | 49.23         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 9        | 49.2          |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 10       | 49.2          |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 16       | 49.08         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 2        | 49.07         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 6        | 48.93         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA | 1:20:A:TYR:C  | 9        | 48.87         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 18       | 48.85         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 7        | 48.78         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 17       | 48.57         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 13       | 48.51         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 19       | 48.47         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 3        | 48.45         |
| (1,32)  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N   | 1:20:A:TYR:CA | 1:20:A:TYR:C  | 6        | 48.43         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 10       | 48.34         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 11       | 48.26         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 15       | 48.16         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 4        | 48.14         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 6        | 48.14         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 9        | 47.94         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 3        | 47.93         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 10       | 47.88         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 9        | 47.8          |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 17       | 47.77         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 9        | 47.63         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 4        | 47.6          |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 13       | 47.59         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 19       | 47.5          |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 5        | 47.49         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 2        | 47.39         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 17       | 47.36         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 2        | 47.28         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 10       | 47.28         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 5        | 47.18         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 14       | 47.05         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 20       | 47.02         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 1        | 46.85         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 16       | 46.84         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 1        | 46.82         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 4        | 46.81         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 2        | 46.8          |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 8        | 46.74         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 20       | 46.7          |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 20       | 46.65         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 11       | 46.54         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 19       | 46.49         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 3        | 46.48         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 2        | 46.45         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 11       | 46.42         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 3        | 46.4          |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 11       | 46.4          |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 14       | 46.35         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 19       | 46.34         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 11       | 46.29         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 1        | 46.17         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 9        | 46.15         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 13       | 46.13         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 9        | 46.13         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 15       | 46.08         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 14       | 45.99         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 20       | 45.98         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 1        | 45.95         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 3        | 45.94         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 7        | 45.92         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 18       | 45.9          |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 2        | 45.89         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 10       | 45.85         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 13       | 45.73         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 4        | 45.67         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 13       | 45.66         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 5        | 45.63         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 6        | 45.62         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 8        | 45.62         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 11       | 45.62         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 1        | 45.59         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 1        | 45.58         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 6        | 45.54         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 7        | 45.47         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 3        | 45.45         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 4        | 45.44         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 20       | 45.44         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 15       | 45.4          |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 13       | 45.39         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 14       | 45.35         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 8        | 45.3          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 5        | 45.22         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 19       | 45.18         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 20       | 45.14         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 2        | 45.12         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 12       | 45.09         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 2        | 45.08         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 2        | 45.07         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 8        | 45.06         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 11       | 45.05         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 12       | 45.05         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 9        | 45.02         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 20       | 45.02         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 16       | 44.94         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 12       | 44.92         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 14       | 44.89         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 15       | 44.86         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 20       | 44.81         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 3        | 44.81         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 15       | 44.8          |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 3        | 44.79         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 5        | 44.78         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 15       | 44.78         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 7        | 44.77         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 19       | 44.75         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 11       | 44.75         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 5        | 44.73         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 1        | 44.68         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 6        | 44.67         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 15       | 44.65         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 18       | 44.62         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 19       | 44.61         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 10       | 44.6          |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 9        | 44.6          |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 16       | 44.54         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 16       | 44.51         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 20       | 44.5          |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 14       | 44.46         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 12       | 44.41         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 18       | 44.41         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 15       | 44.41         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 3        | 44.33         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 12       | 44.3          |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 15       | 44.3          |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 11       | 44.27         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 16       | 44.27         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 18       | 44.22         |
| (1,131) | 1:74:A:VAL:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA | 1:75:A:GLU:C  | 8        | 44.22         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 19       | 44.22         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 17       | 44.11         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 4        | 44.1          |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 16       | 44.08         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 10       | 44.07         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 20       | 44.02         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 19       | 43.98         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 12       | 43.96         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 11       | 43.94         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 12       | 43.9          |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 4        | 43.9          |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 20       | 43.89         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 11       | 43.89         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 16       | 43.87         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 19       | 43.87         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 12       | 43.86         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 11       | 43.81         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 15       | 43.81         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 8        | 43.79         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 6        | 43.76         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 20       | 43.76         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 20       | 43.76         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 14       | 43.75         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 19       | 43.74         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 1        | 43.72         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 12       | 43.71         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 14       | 43.71         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 12       | 43.65         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 14       | 43.64         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 17       | 43.61         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 5        | 43.61         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 16       | 43.6          |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 5        | 43.57         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 9        | 43.57         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 17       | 43.51         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 18       | 43.5          |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 6        | 43.49         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 17       | 43.48         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 15       | 43.47         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 9        | 43.47         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 15       | 43.42         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 14       | 43.4          |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 1        | 43.34         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 8        | 43.34         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 18       | 43.3          |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 8        | 43.29         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 11       | 43.29         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 18       | 43.13         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 17       | 43.07         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 16       | 43.05         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 18       | 43.04         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 7        | 43.04         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 14       | 43.02         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 1        | 42.9          |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 16       | 42.89         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 14       | 42.84         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 14       | 42.84         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 8        | 42.75         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 14       | 42.72         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 12       | 42.67         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 20       | 42.67         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 4        | 42.66         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 7        | 42.62         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 1        | 42.57         |
| (1,208) | 1:117:A:GLN:N | 1:117:A:GLN:CA | 1:117:A:GLN:C | 1:118:A:GLN:N | 3        | 42.54         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 19       | 42.52         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 10       | 42.51         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 18       | 42.48         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 18       | 42.47         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 12       | 42.46         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 3        | 42.45         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 6        | 42.34         |
| (1,212) | 1:119:A:GLY:N | 1:119:A:GLY:CA | 1:119:A:GLY:C | 1:120:A:TRP:N | 16       | 42.31         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 14       | 42.25         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 17       | 42.22         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 18       | 42.17         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 16       | 42.09         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 6        | 42.06         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 14       | 42.01         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 7        | 42.01         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 17       | 42.0          |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 2        | 41.94         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 9        | 41.93         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 4        | 41.86         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 13       | 41.86         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 16       | 41.73         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 9        | 41.73         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 7        | 41.69         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 15       | 41.52         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 4        | 41.51         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 11       | 41.49         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 3        | 41.44         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 12       | 41.43         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 18       | 41.43         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 10       | 41.38         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 7        | 41.34         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 10       | 41.34         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 16       | 41.28         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 17       | 41.24         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 10       | 41.23         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 1        | 41.19         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 17       | 41.17         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 13       | 41.1          |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 8        | 41.09         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 16       | 41.07         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 6        | 41.05         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 13       | 41.04         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 3        | 41.0          |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 7        | 40.97         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 18       | 40.95         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 16       | 40.93         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 13       | 40.91         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 5        | 40.86         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 2        | 40.86         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 7        | 40.85         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 12       | 40.83         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 1        | 40.81         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 16       | 40.8          |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 19       | 40.76         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 18       | 40.75         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 13       | 40.74         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 12       | 40.72         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 6        | 40.66         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 18       | 40.62         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 3        | 40.56         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 5        | 40.53         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 15       | 40.52         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 3        | 40.49         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 13       | 40.47         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 12       | 40.46         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 16       | 40.46         |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 18       | 40.44         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 8        | 40.44         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 2        | 40.4          |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 1        | 40.4          |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 15       | 40.38         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 17       | 40.38         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 12       | 40.38         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 13       | 40.35         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 4        | 40.35         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 11       | 40.33         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 18       | 40.32         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 13       | 40.3          |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 3        | 40.29         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 15       | 40.28         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 13       | 40.27         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 15       | 40.23         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 6        | 40.23         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 14       | 40.22         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 1        | 40.21         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 16       | 40.2          |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 12       | 40.19         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 17       | 40.13         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 9        | 40.09         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 3        | 40.07         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 7        | 40.04         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 17       | 40.03         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 8        | 40.02         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 13       | 39.96         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 19       | 39.95         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 3        | 39.94         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 18       | 39.93         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 17       | 39.93         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 17       | 39.85         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 1        | 39.8          |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 3        | 39.76         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 9        | 39.76         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 19       | 39.75         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 14       | 39.74         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 20       | 39.73         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 6        | 39.71         |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 17       | 39.7          |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 13       | 39.7          |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 13       | 39.68         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 4        | 39.65         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 19       | 39.62         |
| (1,21)  | 1:14:A:GLY:N  | 1:14:A:GLY:CA  | 1:14:A:GLY:C  | 1:15:A:LYS:N  | 3        | 39.59         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 18       | 39.58         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 3        | 39.57         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 10       | 39.56         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 20       | 39.54         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 8        | 39.51         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 7        | 39.49         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 12       | 39.49         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 9        | 39.48         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 19       | 39.46         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 17       | 39.45         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 4        | 39.45         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 17       | 39.43         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 18       | 39.4          |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 16       | 39.39         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 2        | 39.37         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 12       | 39.37         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 20       | 39.35         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 19       | 39.31         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 11       | 39.3          |
| (1,230) | 1:128:A:LYS:N | 1:128:A:LYS:CA | 1:128:A:LYS:C | 1:129:A:ARG:N | 13       | 39.3          |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 2        | 39.29         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 1        | 39.29         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 11       | 39.29         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 16       | 39.22         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 6        | 39.2          |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 5        | 39.18         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 14       | 39.16         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 8        | 39.15         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 11       | 39.13         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 11       | 39.12         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 14       | 39.12         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 11       | 39.11         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 6        | 39.08         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 9        | 39.07         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 16       | 39.0          |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 18       | 39.0          |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 19       | 38.99         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 10       | 38.99         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 4        | 38.95         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 12       | 38.94         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 5        | 38.94         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 16       | 38.93         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 20       | 38.93         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 12       | 38.92         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 17       | 38.92         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 13       | 38.91         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 9        | 38.9          |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 7        | 38.89         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 6        | 38.86         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 2        | 38.85         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 5        | 38.84         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 14       | 38.84         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 18       | 38.83         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 3        | 38.8          |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 2        | 38.79         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 5        | 38.78         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 18       | 38.67         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 8        | 38.65         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 11       | 38.64         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 18       | 38.59         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 20       | 38.59         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 18       | 38.57         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 4        | 38.52         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 4        | 38.47         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 20       | 38.47         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 19       | 38.43         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 1        | 38.42         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 20       | 38.42         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 18       | 38.42         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 17       | 38.32         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 15       | 38.3          |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 1        | 38.28         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 17       | 38.26         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 15       | 38.23         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 5        | 38.16         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 7        | 38.13         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 10       | 38.1          |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 9        | 38.09         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 3        | 38.05         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 4        | 38.02         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 7        | 38.01         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 1        | 37.99         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 3        | 37.98         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 19       | 37.98         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 11       | 37.94         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 14       | 37.92         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 3        | 37.9          |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 14       | 37.9          |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 20       | 37.88         |
| (1,228) | 1:127:A:PHE:N | 1:127:A:PHE:CA | 1:127:A:PHE:C | 1:128:A:LYS:N | 3        | 37.87         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 2        | 37.87         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 15       | 37.86         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 3        | 37.85         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 15       | 37.85         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 19       | 37.82         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 2        | 37.82         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 6        | 37.81         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 20       | 37.78         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 12       | 37.77         |
| (1,27)  | 1:17:A:TRP:N  | 1:17:A:TRP:CA  | 1:17:A:TRP:C  | 1:18:A:ARG:N  | 9        | 37.72         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 16       | 37.71         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 15       | 37.71         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 14       | 37.7          |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 7        | 37.69         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 5        | 37.67         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 19       | 37.62         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 13       | 37.56         |
| (1,236) | 1:131:A:VAL:N | 1:131:A:VAL:CA | 1:131:A:VAL:C | 1:132:A:GLU:N | 13       | 37.55         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 5        | 37.54         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 3        | 37.53         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 9        | 37.5          |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 11       | 37.49         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 16       | 37.49         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 13       | 37.47         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 10       | 37.45         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 20       | 37.45         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 12       | 37.44         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 17       | 37.38         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 16       | 37.35         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 2        | 37.34         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 8        | 37.32         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 17       | 37.31         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 19       | 37.26         |
| (1,206) | 1:116:A:GLN:N | 1:116:A:GLN:CA | 1:116:A:GLN:C | 1:117:A:GLN:N | 2        | 37.25         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 11       | 37.24         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 5        | 37.23         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 15       | 37.21         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 12       | 37.2          |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 10       | 37.16         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 14       | 37.13         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 20       | 37.11         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 11       | 37.1          |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 20       | 37.07         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 16       | 37.07         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 20       | 36.98         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 9        | 36.96         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 3        | 36.94         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 2        | 36.89         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 17       | 36.87         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 19       | 36.85         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 15       | 36.81         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 14       | 36.71         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 8        | 36.68         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 2        | 36.67         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 13       | 36.66         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 7        | 36.63         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 20       | 36.58         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 12       | 36.55         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 1        | 36.51         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 1        | 36.51         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 11       | 36.49         |
| (1,49)  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N   | 1:30:A:ASN:CA | 1:30:A:ASN:C  | 11       | 36.48         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 20       | 36.48         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 8        | 36.42         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 12       | 36.4          |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 14       | 36.39         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 4        | 36.34         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 4        | 36.32         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 19       | 36.3          |
| (1,234) | 1:130:A:HIS:N | 1:130:A:HIS:CA | 1:130:A:HIS:C | 1:131:A:VAL:N | 17       | 36.29         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 1        | 36.28         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 1        | 36.2          |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 19       | 36.19         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 9        | 36.19         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 7        | 36.17         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 1        | 36.11         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 8        | 36.09         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 19       | 36.08         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 8        | 36.08         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 10       | 36.06         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 20       | 36.06         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 10       | 36.04         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 7        | 36.0          |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 7        | 35.92         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 3        | 35.82         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 19       | 35.82         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 5        | 35.81         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 13       | 35.79         |
| (1,23)  | 1:15:A:LYS:N  | 1:15:A:LYS:CA  | 1:15:A:LYS:C  | 1:16:A:VAL:N  | 6        | 35.79         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 11       | 35.75         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 1        | 35.69         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 11       | 35.66         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 3        | 35.66         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 4        | 35.65         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 6        | 35.58         |
| (1,202) | 1:114:A:GLU:N | 1:114:A:GLU:CA | 1:114:A:GLU:C | 1:115:A:GLN:N | 18       | 35.56         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 16       | 35.54         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 2        | 35.5          |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 17       | 35.5          |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 5        | 35.48         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 10       | 35.47         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 14       | 35.45         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 16       | 35.45         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 2        | 35.44         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 19       | 35.39         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 19       | 35.38         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 10       | 35.36         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 17       | 35.36         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 9        | 35.32         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 20       | 35.29         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 9        | 35.28         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 14       | 35.24         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 17       | 35.24         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 19       | 35.21         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 6        | 35.17         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 19       | 35.11         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 16       | 35.06         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 11       | 35.05         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 1        | 35.03         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 2        | 35.03         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 18       | 35.02         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 11       | 35.01         |
| (1,133) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N   | 1:76:A:ASN:CA | 1:76:A:ASN:C  | 15       | 34.99         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 12       | 34.97         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 10       | 34.94         |
| (1,40)  | 1:25:A:ASP:N  | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 1:26:A:ILE:N  | 6        | 34.93         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 8        | 34.92         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 4        | 34.91         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 13       | 34.85         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 9        | 34.82         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 7        | 34.81         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 10       | 34.77         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 5        | 34.76         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 12       | 34.75         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 14       | 34.7          |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 11       | 34.7          |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 2        | 34.69         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 1        | 34.66         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 4        | 34.62         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 2        | 34.61         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 18       | 34.56         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 10       | 34.49         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 1        | 34.47         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 11       | 34.43         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 3        | 34.39         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 8        | 34.37         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 15       | 34.34         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 6        | 34.33         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 5        | 34.32         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 3        | 34.31         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 7        | 34.28         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 6        | 34.26         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 14       | 34.25         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 12       | 34.25         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 5        | 34.22         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 16       | 34.22         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 19       | 34.21         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 1        | 34.2          |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 15       | 34.19         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 14       | 34.12         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 8        | 34.1          |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 1        | 34.09         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 6        | 34.09         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 2        | 34.08         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 18       | 34.07         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 2        | 34.06         |
| (1,210) | 1:118:A:GLN:N | 1:118:A:GLN:CA | 1:118:A:GLN:C | 1:119:A:GLY:N | 8        | 34.05         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 20       | 34.05         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 7        | 34.05         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 12       | 34.05         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 18       | 34.02         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 1        | 33.99         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 15       | 33.99         |
| (1,224) | 1:125:A:ASN:N | 1:125:A:ASN:CA | 1:125:A:ASN:C | 1:126:A:ASN:N | 1        | 33.97         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 5        | 33.96         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 9        | 33.95         |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 3        | 33.93         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 11       | 33.93         |
| (1,204) | 1:115:A:GLN:N | 1:115:A:GLN:CA | 1:115:A:GLN:C | 1:116:A:GLN:N | 15       | 33.9          |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 18       | 33.89         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 18       | 33.88         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 20       | 33.87         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 15       | 33.86         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 18       | 33.86         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 5        | 33.83         |
| (1,216) | 1:121:A:GLN:N | 1:121:A:GLN:CA | 1:121:A:GLN:C | 1:122:A:ALA:N | 16       | 33.81         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 19       | 33.77         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 6        | 33.76         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 16       | 33.75         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 20       | 33.71         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 9        | 33.69         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 3        | 33.68         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 15       | 33.63         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 6        | 33.61         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 9        | 33.58         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 14       | 33.53         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 8        | 33.47         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 8        | 33.43         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 10       | 33.4          |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 4        | 33.37         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 19       | 33.34         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 2        | 33.32         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 2        | 33.32         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 4        | 33.31         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 2        | 33.19         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 9        | 33.17         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 1        | 33.17         |
| (1,25)  | 1:16:A:VAL:N  | 1:16:A:VAL:CA  | 1:16:A:VAL:C  | 1:17:A:TRP:N  | 2        | 33.17         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 1        | 33.16         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 12       | 33.11         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 4        | 33.09         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 17       | 33.02         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 16       | 32.98         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 18       | 32.96         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 6        | 32.93         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 3        | 32.92         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 9        | 32.91         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 10       | 32.91         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 20       | 32.9          |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 18       | 32.88         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 19       | 32.83         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 14       | 32.82         |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 8        | 32.69         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 14       | 32.67         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 15       | 32.63         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 7        | 32.62         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 1        | 32.59         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 18       | 32.47         |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 2        | 32.46         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 17       | 32.4          |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 5        | 32.37         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 10       | 32.35         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 20       | 32.29         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 6        | 32.07         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 17       | 32.05         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 5        | 32.03         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 5        | 31.92         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 2        | 31.87         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 9        | 31.86         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 15       | 31.85         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 16       | 31.84         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 1        | 31.8          |
| (1,134) | 1:76:A:ASN:N  | 1:76:A:ASN:CA  | 1:76:A:ASN:C  | 1:77:A:LYS:N  | 7        | 31.78         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 17       | 31.77         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 4        | 31.71         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 16       | 31.71         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 11       | 31.69         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 10       | 31.68         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 15       | 31.67         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 20       | 31.65         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 2        | 31.62         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 20       | 31.53         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 10       | 31.52         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 7        | 31.5          |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 2        | 31.48         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 7        | 31.43         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 3        | 31.41         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 15       | 31.26         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 14       | 31.22         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 20       | 31.22         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 11       | 31.21         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 8        | 31.16         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 3        | 31.16         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 6        | 31.12         |
| (1,232) | 1:129:A:ARG:N | 1:129:A:ARG:CA | 1:129:A:ARG:C | 1:130:A:HIS:N | 3        | 31.07         |
| (1,214) | 1:120:A:TRP:N | 1:120:A:TRP:CA | 1:120:A:TRP:C | 1:121:A:GLN:N | 3        | 31.04         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 12       | 30.99         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 7        | 30.99         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 17       | 30.95         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 14       | 30.92         |
| (1,36)  | 1:23:A:PRO:N  | 1:23:A:PRO:CA  | 1:23:A:PRO:C  | 1:24:A:GLU:N  | 13       | 30.81         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 2        | 30.79         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 19       | 30.73         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 20       | 30.69         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 12       | 30.67         |
| (1,218) | 1:122:A:ALA:N | 1:122:A:ALA:CA | 1:122:A:ALA:C | 1:123:A:ILE:N | 13       | 30.57         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 7        | 30.56         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 12       | 30.56         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 11       | 30.53         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 1        | 30.52         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 14       | 30.44         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 10       | 30.44         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 4        | 30.4          |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 18       | 30.37         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 6        | 30.29         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 20       | 30.24         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 18       | 30.2          |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 14       | 30.14         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 6        | 30.13         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 2        | 30.13         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 20       | 29.96         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 15       | 29.91         |
| (1,226) | 1:126:A:ASN:N | 1:126:A:ASN:CA | 1:126:A:ASN:C | 1:127:A:PHE:N | 13       | 29.84         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 5        | 29.77         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 11       | 29.71         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 4        | 29.71         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 4        | 29.71         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 1        | 29.71         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 5        | 29.64         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 9        | 29.62         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 18       | 29.47         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 9        | 29.42         |
| (1,38)  | 1:24:A:GLU:N  | 1:24:A:GLU:CA  | 1:24:A:GLU:C  | 1:25:A:ASP:N  | 13       | 29.42         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 19       | 29.39         |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 1        | 29.22         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 8        | 29.2          |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 16       | 29.19         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 12       | 29.1          |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 4        | 29.1          |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 8        | 29.08         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 19       | 29.07         |
| (1,222) | 1:124:A:LEU:N | 1:124:A:LEU:CA | 1:124:A:LEU:C | 1:125:A:ASN:N | 13       | 29.05         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 17       | 28.98         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 10       | 28.94         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 15       | 28.92         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 10       | 28.91         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 11       | 28.91         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 6        | 28.87         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 4        | 28.86         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 4        | 28.81         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 3        | 28.77         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 3        | 28.76         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 7        | 28.68         |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 19       | 28.6          |
| (1,238) | 1:132:A:GLU:N | 1:132:A:GLU:CA | 1:132:A:GLU:C | 1:133:A:SER:N | 13       | 28.59         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 17       | 28.56         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 5        | 28.55         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 6        | 28.44         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 17       | 28.4          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 6        | 28.39         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 10       | 28.38         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 16       | 28.37         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 13       | 28.3          |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 2        | 28.25         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 15       | 28.24         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 19       | 28.23         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 18       | 28.19         |
| (1,132) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ASN:N  | 12       | 28.17         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 1        | 28.11         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 16       | 28.09         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 13       | 28.06         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 4        | 28.0          |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 3        | 27.91         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 19       | 27.91         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 20       | 27.81         |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 7        | 27.81         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 5        | 27.73         |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 8        | 27.64         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 20       | 27.61         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 13       | 27.56         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 12       | 27.53         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 15       | 27.5          |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 2        | 27.49         |
| (1,19)  | 1:13:A:VAL:N  | 1:13:A:VAL:CA  | 1:13:A:VAL:C  | 1:14:A:GLY:N  | 8        | 27.49         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 11       | 27.33         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 13       | 27.19         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 20       | 27.15         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 10       | 27.06         |
| (1,200) | 1:113:A:VAL:N | 1:113:A:VAL:CA | 1:113:A:VAL:C | 1:114:A:GLU:N | 5        | 27.05         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 6        | 27.05         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 16       | 27.03         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 14       | 26.84         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 5        | 26.76         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 8        | 26.72         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 7        | 26.66         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 14       | 26.65         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 13       | 26.61         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 17       | 26.52         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 8        | 26.5          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 9        | 26.48         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 7        | 26.45         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 11       | 26.2          |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 4        | 26.17         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 10       | 26.16         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 9        | 26.13         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 6        | 26.13         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 5        | 26.06         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 12       | 25.94         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 6        | 25.93         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 5        | 25.88         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 8        | 25.87         |
| (1,220) | 1:123:A:ILE:N | 1:123:A:ILE:CA | 1:123:A:ILE:C | 1:124:A:LEU:N | 10       | 25.85         |
| (1,29)  | 1:18:A:ARG:N  | 1:18:A:ARG:CA  | 1:18:A:ARG:C  | 1:19:A:ALA:N  | 9        | 25.84         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 8        | 25.82         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 13       | 25.51         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 10       | 25.3          |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 4        | 25.08         |
| (1,124) | 1:71:A:THR:N  | 1:71:A:THR:CA  | 1:71:A:THR:C  | 1:72:A:LYS:N  | 7        | 24.89         |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 7        | 24.72         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 12       | 24.53         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 8        | 24.5          |
| (1,169) | 1:96:A:PRO:N  | 1:96:A:PRO:CA  | 1:96:A:PRO:C  | 1:97:A:GLN:N  | 9        | 24.48         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 12       | 24.4          |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 9        | 24.27         |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 5        | 24.15         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 4        | 24.15         |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 1        | 24.12         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 1        | 23.94         |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 10       | 23.88         |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 7        | 23.85         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 11       | 23.83         |
| (1,104) | 1:61:A:SER:N  | 1:61:A:SER:CA  | 1:61:A:SER:C  | 1:62:A:MET:N  | 6        | 23.82         |
| (1,56)  | 1:35:A:ASP:N  | 1:35:A:ASP:CA  | 1:35:A:ASP:C  | 1:36:A:TRP:N  | 13       | 23.82         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 1        | 23.64         |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 4        | 23.45         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 4        | 23.18         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 14       | 23.02         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 18       | 22.75         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 18       | 22.58         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 6        | 22.57         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 14       | 22.52         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 16       | 22.47         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 9        | 22.33         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 17       | 22.14         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 13       | 22.12         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 6        | 22.11         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 16       | 21.98         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 9        | 21.76         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 17       | 21.72         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 4        | 21.57         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 5        | 21.52         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 9        | 21.49         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 7        | 21.22         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 13       | 21.22         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 8        | 21.12         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 5        | 21.06         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 10       | 20.96         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 13       | 20.83         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 6        | 20.81         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 3        | 20.79         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 15       | 20.75         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 10       | 20.72         |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 3        | 20.61         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 5        | 20.57         |
| (1,98)  | 1:58:A:LYS:N  | 1:58:A:LYS:CA  | 1:58:A:LYS:C  | 1:59:A:ASP:N  | 10       | 20.57         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 6        | 20.51         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 1        | 20.44         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 8        | 20.24         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 17       | 19.88         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 2        | 19.81         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 16       | 19.72         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 19       | 19.69         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 11       | 19.52         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 9        | 19.42         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 7        | 19.41         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 16       | 19.38         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 7        | 19.24         |
| (1,193) | 1:109:A:THR:N | 1:109:A:THR:CA | 1:109:A:THR:C | 1:110:A:GLU:N | 1        | 19.16         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 14       | 19.13         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 12       | 19.03         |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 1        | 18.88         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 1        | 18.86         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 15       | 18.86         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 17       | 18.78         |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 13       | 18.75         |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 2        | 18.73         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 3        | 18.62         |
| (1,44)  | 1:27:A:LYS:N  | 1:27:A:LYS:CA  | 1:27:A:LYS:C  | 1:28:A:GLN:N  | 3        | 18.36         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 6        | 18.34         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 11       | 17.93         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 2        | 17.77         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 12       | 17.2          |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 4        | 17.17         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 20       | 17.08         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 15       | 16.9          |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 4        | 16.84         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 8        | 16.84         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 3        | 16.74         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 19       | 16.58         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 8        | 16.54         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 18       | 16.36         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 11       | 16.17         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 7        | 16.15         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 16       | 16.14         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 12       | 16.11         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 9        | 16.03         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 7        | 15.64         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 5        | 15.61         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 16       | 15.61         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 8        | 15.57         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 10       | 15.56         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 9        | 15.56         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 18       | 15.47         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 6        | 15.34         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 7        | 14.91         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 10       | 14.84         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 15       | 14.79         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 1        | 14.51         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 5        | 14.48         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 20       | 14.43         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 4        | 14.36         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 13       | 14.32         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 11       | 14.3          |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 14       | 14.29         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 11       | 14.21         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 4        | 14.2          |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 2        | 14.19         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 9        | 14.14         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 8        | 14.14         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 14       | 13.99         |
| (1,195) | 1:110:A:GLU:N | 1:110:A:GLU:CA | 1:110:A:GLU:C | 1:111:A:TYR:N | 17       | 13.88         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 12       | 13.68         |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 13       | 13.63         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 10       | 13.41         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 17       | 13.4          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 16       | 13.25         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 14       | 13.19         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 2        | 13.17         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 15       | 13.15         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 19       | 13.07         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 16       | 13.04         |
| (1,46)  | 1:28:A:GLN:N  | 1:28:A:GLN:CA  | 1:28:A:GLN:C  | 1:29:A:TRP:N  | 5        | 12.93         |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 12       | 12.92         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 20       | 12.84         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 13       | 12.65         |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 18       | 12.57         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 2        | 12.53         |
| (1,33)  | 1:21:A:THR:N  | 1:21:A:THR:CA  | 1:21:A:THR:C  | 1:22:A:THR:N  | 3        | 12.38         |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 19       | 12.26         |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 18       | 12.25         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 3        | 12.01         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 19       | 11.74         |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 18       | 11.74         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 19       | 11.33         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 12       | 10.96         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 18       | 10.95         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 11       | 10.94         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 15       | 10.65         |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 16       | 10.37         |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 19       | 10.17         |
| (1,102) | 1:60:A:GLY:N  | 1:60:A:GLY:CA  | 1:60:A:GLY:C  | 1:61:A:SER:N  | 15       | 10.16         |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 14       | 9.8           |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 4        | 9.75          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 17       | 9.72          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 1        | 9.71          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 11       | 9.68          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 13       | 9.68          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 17       | 9.53          |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 17       | 9.51          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 15       | 9.51          |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 10       | 9.49          |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 20       | 9.46          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 20       | 9.42          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 16       | 9.33          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 13       | 9.01          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 15       | 9.0           |
| (1,171) | 1:97:A:GLN:N  | 1:97:A:GLN:CA  | 1:97:A:GLN:C  | 1:98:A:GLY:N  | 14       | 8.99          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 17       | 8.96          |
| (1,42)  | 1:26:A:ILE:N  | 1:26:A:ILE:CA  | 1:26:A:ILE:C  | 1:27:A:LYS:N  | 9        | 8.89          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 14       | 8.82          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 16       | 8.75          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 11       | 8.46          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 2        | 8.37          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 4        | 8.26          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 20       | 8.22          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 12       | 8.17          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 8        | 7.57          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 8        | 7.34          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 4        | 7.25          |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 5        | 7.15          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 14       | 7.12          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 10       | 7.01          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 11       | 6.97          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 14       | 6.9           |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 15       | 6.89          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 1        | 6.49          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 9        | 6.04          |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 8        | 5.99          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 7        | 5.92          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 18       | 5.88          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 19       | 5.82          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 12       | 5.65          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 2        | 5.64          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 13       | 5.33          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 12       | 5.29          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 16       | 5.2           |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 15       | 5.06          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 10       | 4.75          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 19       | 4.68          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 20       | 4.63          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 5        | 4.38          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 13       | 4.38          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 16       | 4.29          |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 6        | 4.24          |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 9        | 4.02          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 3        | 3.88          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 20       | 3.84          |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 10       | 3.72          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 17       | 3.7           |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 5        | 3.69          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 3        | 3.6           |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 4        | 3.44          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 7        | 3.21          |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 6        | 3.19          |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 8        | 3.14          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 18       | 3.11          |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 7        | 3.01          |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 9        | 2.64          |
| (1,240) | 1:133:A:SER:N | 1:133:A:SER:CA | 1:133:A:SER:C | 1:134:A:HIS:N | 6        | 2.52          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 3        | 2.4           |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 20       | 2.37          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 10       | 2.37          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 11       | 2.34          |
| (1,31)  | 1:19:A:ALA:N  | 1:19:A:ALA:CA  | 1:19:A:ALA:C  | 1:20:A:TYR:N  | 7        | 2.19          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 14       | 2.01          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 5        | 1.86          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 12       | 1.83          |
| (1,78)  | 1:48:A:GLY:N  | 1:48:A:GLY:CA  | 1:48:A:GLY:C  | 1:49:A:GLY:N  | 6        | 1.81          |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 1        | 1.8           |
| (1,242) | 1:134:A:HIS:N | 1:134:A:HIS:CA | 1:134:A:HIS:C | 1:135:A:LEU:N | 9        | 1.63          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 7        | 1.61          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 5        | 1.54          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 7        | 1.41          |
| (1,100) | 1:59:A:ASP:N  | 1:59:A:ASP:CA  | 1:59:A:ASP:C  | 1:60:A:GLY:N  | 10       | 1.4           |
| (1,48)  | 1:29:A:TRP:N  | 1:29:A:TRP:CA  | 1:29:A:TRP:C  | 1:30:A:ASN:N  | 2        | 1.08          |
| (1,54)  | 1:34:A:ASP:N  | 1:34:A:ASP:CA  | 1:34:A:ASP:C  | 1:35:A:ASP:N  | 15       | 1.06          |