



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 10:43 AM UTC

PDB ID : 2NDP / pdb_00002ndp
BMRB ID : 26068
Title : Structure of DNA-binding HU protein from micoplasma Mycoplasma gallisepticum
Authors : Altukhov, D.A.; Talyzina, A.A.; Agapova, Y.K.; Vlaskina, A.V.; Korzhenevskiy, D.A.; Bocharov, E.V.; Rakitina, T.V.; Timofeev, V.I.; Popov, V.O.
Deposited on : 2016-09-13

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

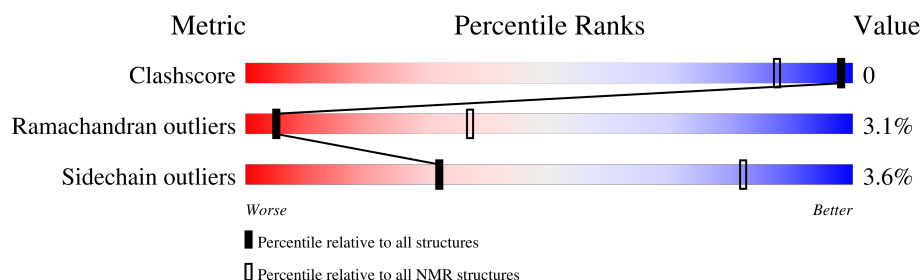
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 20%.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	99	
1	B	99	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:4-A:60, A:80-A:99, B:1-B:61, B:80-B:97 (156)	1.37	9

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 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3252 atoms, of which 1714 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Histone-like DNA-binding superfamily protein.

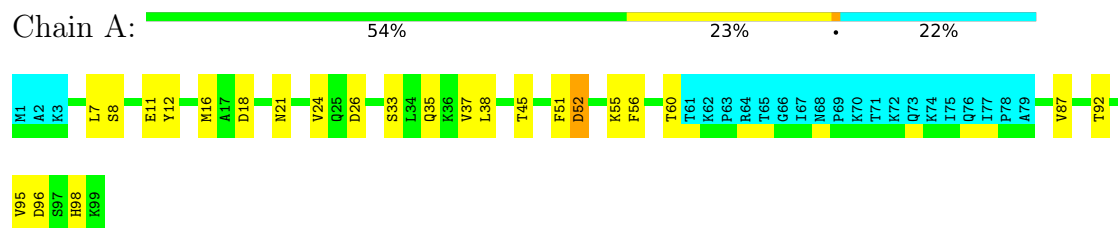
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	99	Total	C	H	N	O	S	0
			1626	492	857	133	142	2	
1	B	99	Total	C	H	N	O	S	0
			1626	492	857	133	142	2	

4 Residue-property plots

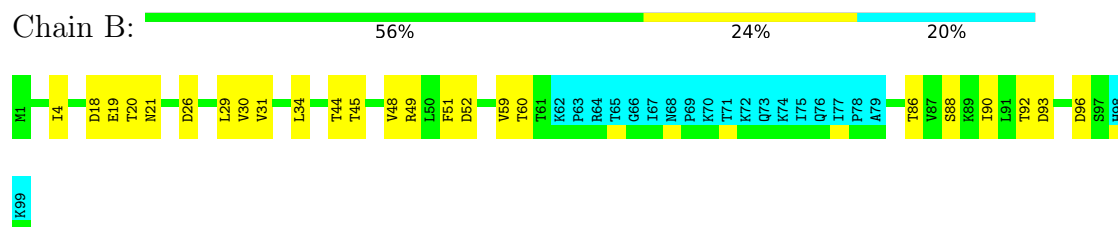
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein



- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

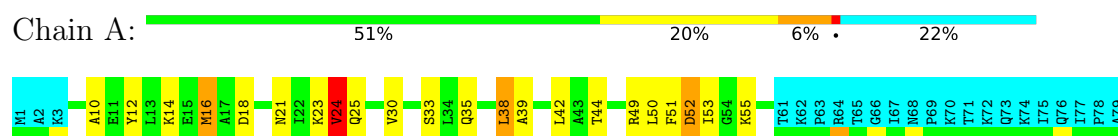


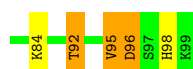
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

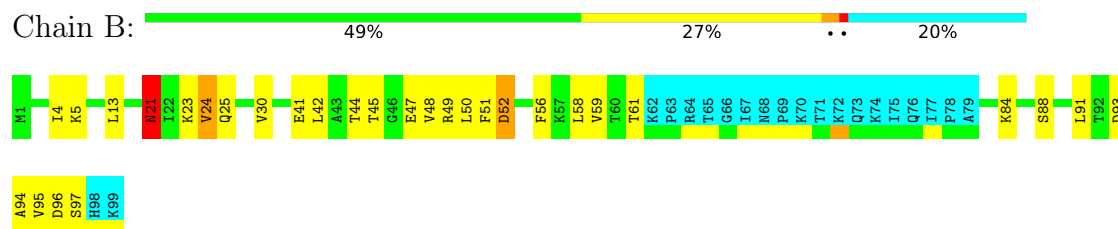
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein



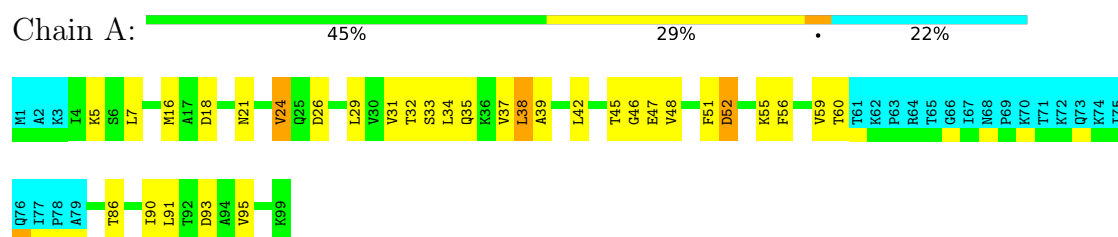


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

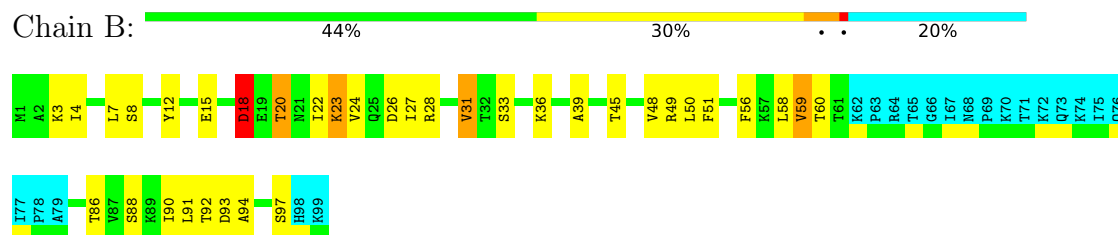


4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

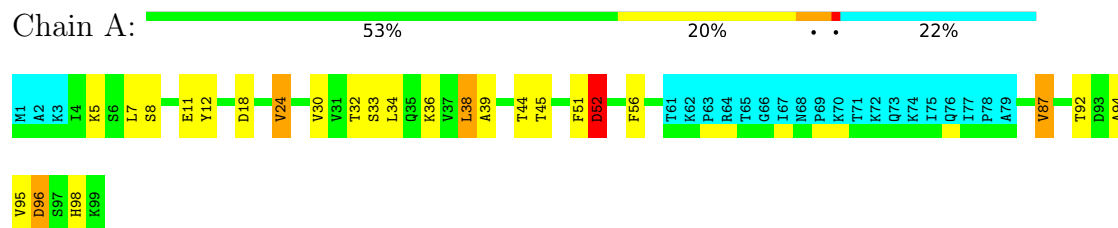


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

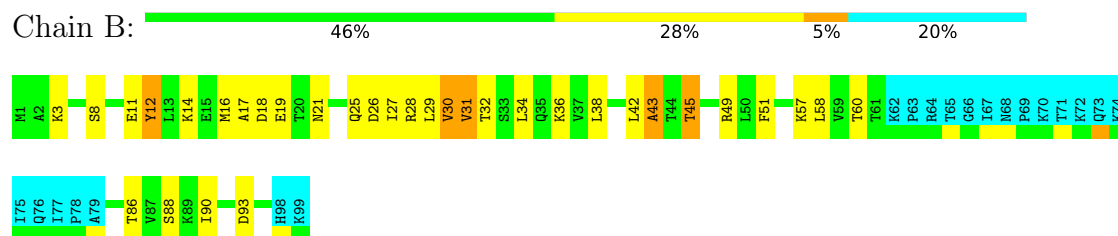


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

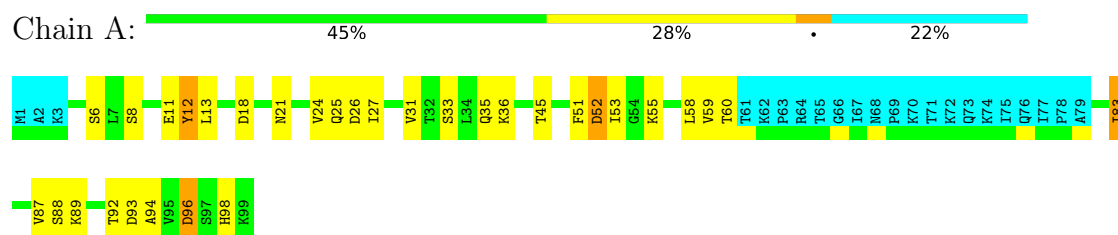


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

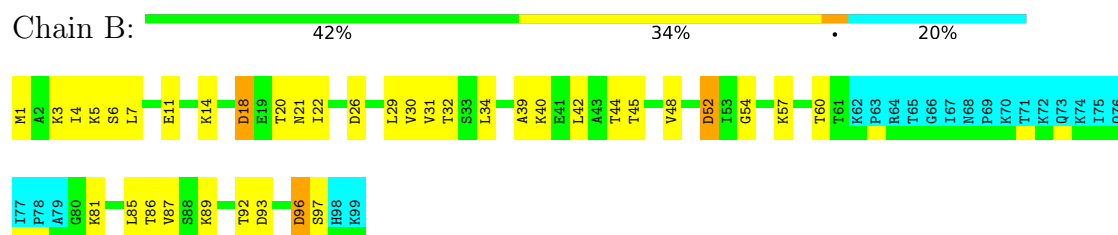


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

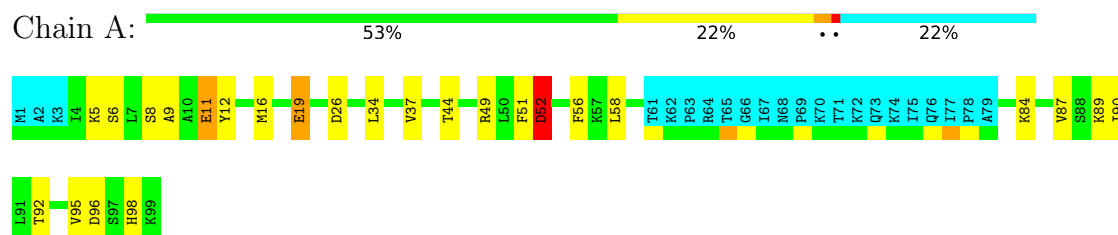


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

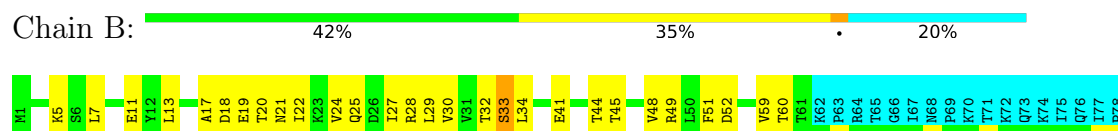


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein



- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein



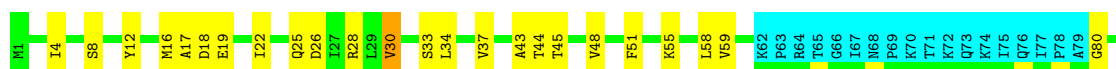


4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

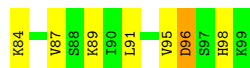
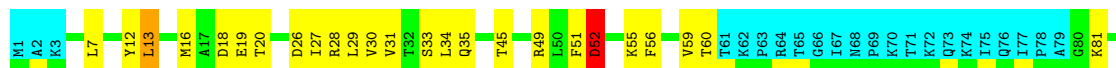


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

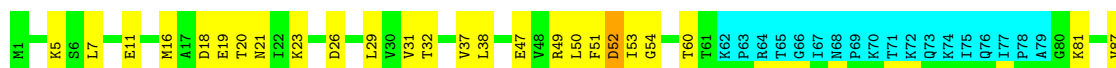


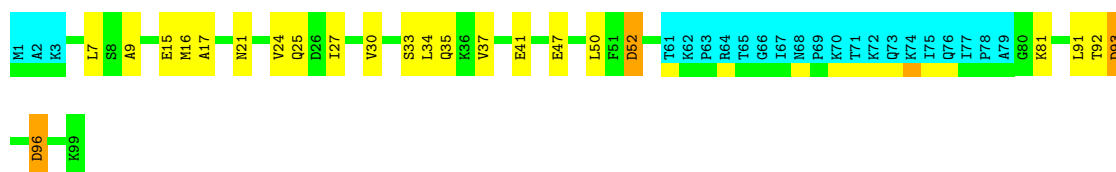
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein



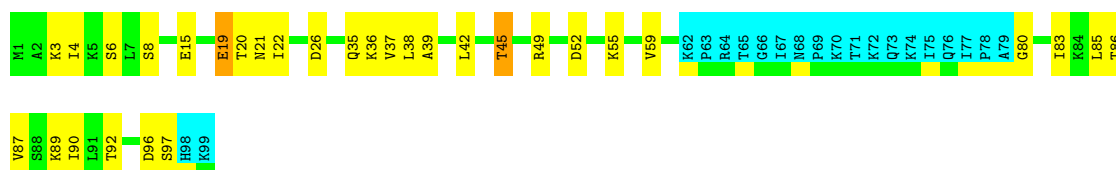
- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein





- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

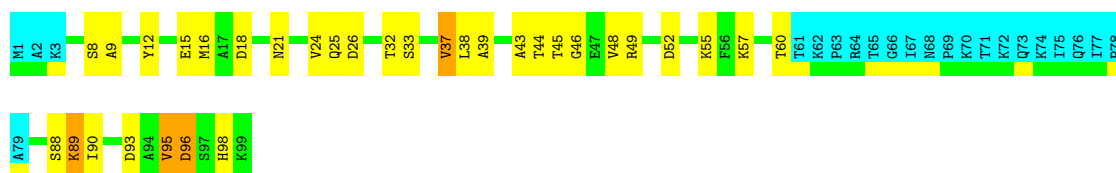
Chain B: 48% 29% 20%



4.2.11 Score per residue for model 11

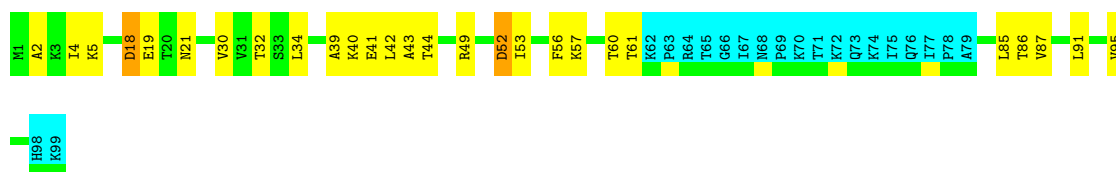
- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

Chain A: 45% 28% 22%



- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

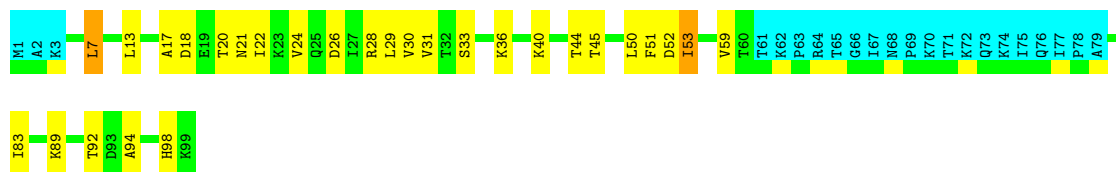
Chain B: 53% 25% 20%



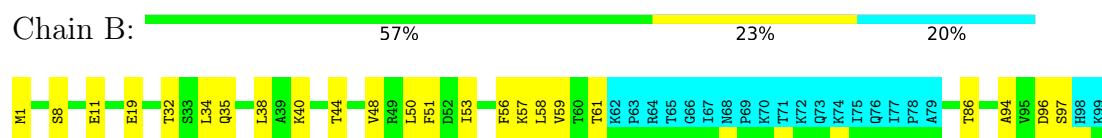
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

Chain A: 49% 26% 22%

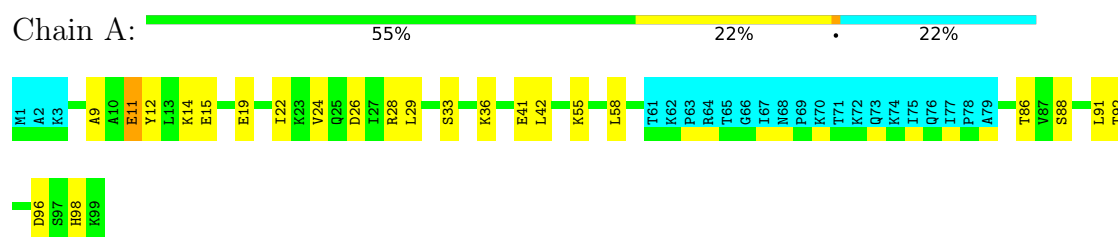


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

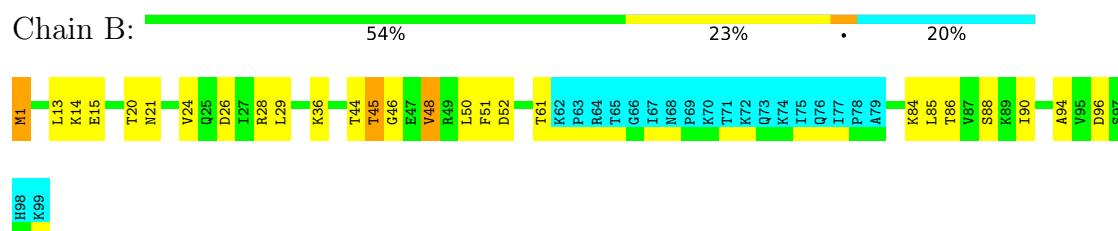


4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

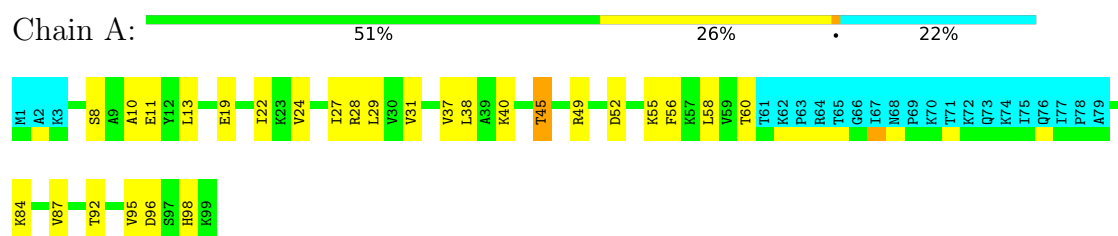


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

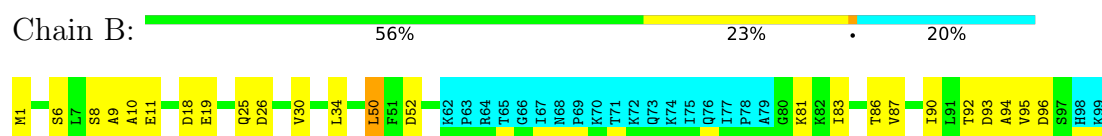


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

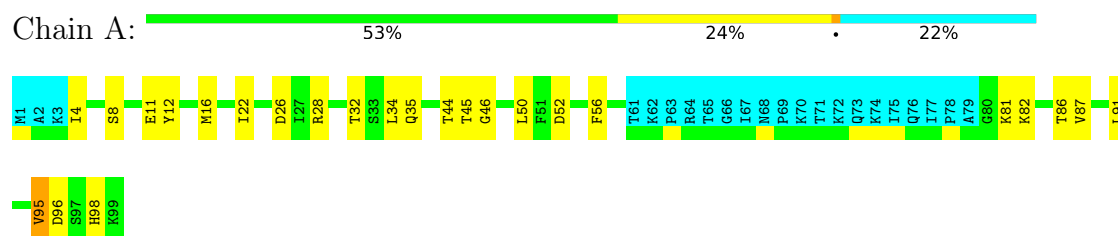


- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein

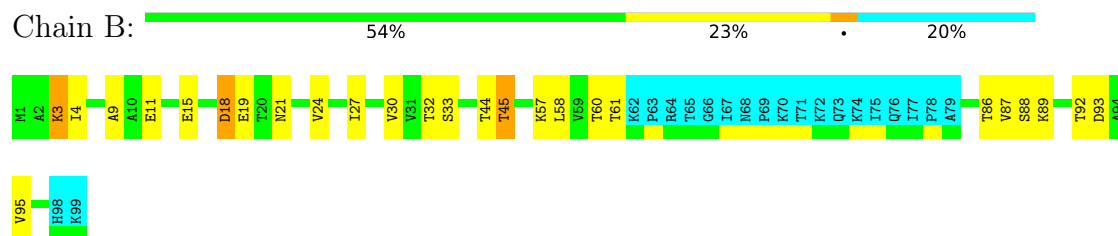


4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein



- Molecule 1: Histone-like DNA-binding superfamily protein



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 5000 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
GROMACS	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	2
Total number of shifts	1011
Number of shifts mapped to atoms	1011
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	20%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.55±0.01	0±0/602 (0.0± 0.0%)	2.48±0.07	40±8/805 (4.9± 1.0%)
1	B	0.53±0.01	0±0/611 (0.0± 0.0%)	2.53±0.12	44±8/820 (5.4± 1.0%)
All	All	0.54	0/18195 (0.0%)	2.51	1256/24375 (5.2%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	1.1±1.0
1	B	0.0±0.0	0.9±1.1
All	All	0	30

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	45	THR	CA-C-N	14.48	132.76	121.61	11	2
1	A	45	THR	C-N-CA	14.48	132.76	121.61	11	2
1	A	55	LYS	CA-C-N	12.27	138.79	122.84	1	2
1	A	55	LYS	C-N-CA	12.27	138.79	122.84	1	2
1	B	86	THR	CB-CA-C	11.68	127.82	111.23	5	9
1	B	52	ASP	CA-CB-CG	11.63	124.23	112.60	1	3
1	A	51	PHE	CA-CB-CG	10.93	124.73	113.80	4	4
1	B	34	LEU	CA-C-N	10.92	135.34	120.38	5	5
1	B	34	LEU	C-N-CA	10.92	135.34	120.38	5	5
1	B	21	ASN	CA-CB-CG	10.85	123.45	112.60	10	7
1	B	4	ILE	CA-C-N	10.62	136.74	120.82	6	7
1	B	4	ILE	C-N-CA	10.62	136.74	120.82	6	7
1	B	88	SER	CA-C-N	10.40	134.21	120.28	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	88	SER	C-N-CA	10.40	134.21	120.28	3	6
1	A	35	GLN	CA-C-N	9.93	133.98	120.38	1	6
1	A	35	GLN	C-N-CA	9.93	133.98	120.38	1	6
1	B	86	THR	CA-C-O	9.78	130.83	120.36	2	2
1	B	56	PHE	CA-CB-CG	9.65	123.45	113.80	2	4
1	A	7	LEU	O-C-N	-9.61	112.05	123.10	12	2
1	B	27	ILE	CA-C-O	-9.42	110.49	120.57	9	2
1	B	11	GLU	CA-C-N	9.40	133.26	120.38	7	3
1	B	11	GLU	C-N-CA	9.40	133.26	120.38	7	3
1	A	85	LEU	O-C-N	-9.22	112.73	123.06	6	1
1	B	86	THR	CA-C-N	9.19	133.12	120.35	5	4
1	B	86	THR	C-N-CA	9.19	133.12	120.35	5	4
1	B	93	ASP	CA-CB-CG	9.12	121.72	112.60	5	6
1	A	34	LEU	CA-C-N	9.11	132.49	120.28	5	1
1	A	34	LEU	C-N-CA	9.11	132.49	120.28	5	1
1	B	31	VAL	CA-C-N	9.10	136.01	121.08	9	2
1	B	31	VAL	C-N-CA	9.10	136.01	121.08	9	2
1	B	96	ASP	CA-CB-CG	9.06	121.66	112.60	4	4
1	A	9	ALA	CA-C-O	-8.99	111.02	120.55	9	3
1	A	98	HIS	ND1-CE1-NE2	8.97	117.38	108.40	13	8
1	A	96	ASP	CA-CB-CG	8.97	121.57	112.60	4	3
1	A	52	ASP	CA-CB-CG	8.89	121.49	112.60	9	5
1	A	31	VAL	CA-C-N	8.82	132.82	120.29	9	3
1	A	31	VAL	C-N-CA	8.82	132.82	120.29	9	3
1	B	27	ILE	CA-C-N	8.74	134.70	120.63	5	2
1	B	27	ILE	C-N-CA	8.74	134.70	120.63	5	2
1	B	35	GLN	CA-C-N	8.73	132.69	120.29	12	3
1	B	35	GLN	C-N-CA	8.73	132.69	120.29	12	3
1	B	80	GLY	CA-C-O	-8.55	116.29	122.45	6	1
1	B	44	THR	CA-C-N	8.52	137.82	121.54	6	4
1	B	44	THR	C-N-CA	8.52	137.82	121.54	6	4
1	B	20	THR	CB-CA-C	8.52	123.49	110.37	4	1
1	A	48	VAL	CB-CA-C	8.48	121.65	110.12	9	2
1	A	9	ALA	CA-C-N	8.47	131.98	120.54	11	4
1	A	9	ALA	C-N-CA	8.47	131.98	120.54	11	4
1	A	52	ASP	CA-C-N	8.45	132.44	120.53	14	4
1	A	52	ASP	C-N-CA	8.45	132.44	120.53	14	4
1	B	92	THR	N-CA-C	-8.43	101.47	112.68	10	1
1	A	21	ASN	CA-CB-CG	8.41	121.01	112.60	6	2
1	A	16	MET	CA-C-N	8.39	132.36	120.28	2	6
1	A	16	MET	C-N-CA	8.39	132.36	120.28	2	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	25	GLN	N-CA-C	8.38	121.47	111.33	11	3
1	B	8	SER	CA-C-N	8.37	131.49	120.28	12	5
1	B	8	SER	C-N-CA	8.37	131.49	120.28	12	5
1	A	18	ASP	CA-CB-CG	8.34	120.94	112.60	4	6
1	A	58	LEU	CA-C-N	8.29	133.78	122.01	14	2
1	A	58	LEU	C-N-CA	8.29	133.78	122.01	14	2
1	B	52	ASP	CA-C-N	8.28	133.79	120.55	10	3
1	B	52	ASP	C-N-CA	8.28	133.79	120.55	10	3
1	B	21	ASN	OD1-CG-ND2	-8.12	114.48	122.60	8	3
1	B	31	VAL	CA-CB-CG1	8.10	124.18	110.40	3	2
1	B	15	GLU	CB-CG-CD	8.07	126.33	112.60	10	1
1	A	27	ILE	CA-C-N	8.05	131.40	120.38	7	2
1	A	27	ILE	C-N-CA	8.05	131.40	120.38	7	2
1	B	59	VAL	CB-CA-C	8.02	122.86	110.50	12	4
1	B	90	ILE	CA-C-O	-8.01	112.62	120.95	13	2
1	A	89	LYS	CA-C-N	7.98	134.62	121.54	6	2
1	A	89	LYS	C-N-CA	7.98	134.62	121.54	6	2
1	B	94	ALA	CA-C-N	7.96	132.12	120.74	8	4
1	B	94	ALA	C-N-CA	7.96	132.12	120.74	8	4
1	B	95	VAL	CA-C-O	7.95	127.78	120.30	15	1
1	A	30	VAL	N-CA-CB	7.91	121.30	110.54	1	1
1	B	90	ILE	O-C-N	-7.88	113.72	121.83	2	2
1	B	90	ILE	CA-C-N	7.86	131.13	120.44	6	4
1	B	90	ILE	C-N-CA	7.86	131.13	120.44	6	4
1	B	5	LYS	N-CA-C	7.83	119.82	111.28	5	1
1	B	3	LYS	CA-C-N	7.83	132.15	120.95	15	4
1	B	3	LYS	C-N-CA	7.83	132.15	120.95	15	4
1	A	56	PHE	CA-C-N	7.83	134.31	122.65	8	3
1	A	56	PHE	C-N-CA	7.83	134.31	122.65	8	3
1	B	28	ARG	CA-C-N	7.78	130.70	120.28	2	2
1	B	28	ARG	C-N-CA	7.78	130.70	120.28	2	2
1	A	10	ALA	CA-C-N	7.77	130.69	120.28	1	1
1	A	10	ALA	C-N-CA	7.77	130.69	120.28	1	1
1	A	93	ASP	CA-CB-CG	7.75	120.35	112.60	6	2
1	A	19	GLU	N-CA-CB	-7.74	99.15	110.53	7	2
1	B	1	MET	CA-C-N	7.73	131.68	120.71	9	5
1	B	1	MET	C-N-CA	7.73	131.68	120.71	9	5
1	A	87	VAL	N-CA-C	7.73	120.22	108.71	7	3
1	B	92	THR	CA-C-N	7.72	130.48	120.44	10	4
1	B	92	THR	C-N-CA	7.72	130.48	120.44	10	4
1	A	95	VAL	CA-C-O	-7.67	113.78	121.45	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	32	THR	N-CA-C	7.65	119.69	111.36	2	1
1	B	26	ASP	CA-C-N	7.64	130.18	120.56	10	4
1	B	26	ASP	C-N-CA	7.64	130.18	120.56	10	4
1	A	81	LYS	CB-CA-C	7.56	122.88	109.65	10	1
1	A	46	GLY	O-C-N	-7.56	117.79	123.61	2	2
1	A	56	PHE	CA-C-O	-7.53	113.08	120.92	8	3
1	A	8	SER	CA-C-N	7.52	130.97	120.29	6	4
1	A	8	SER	C-N-CA	7.52	130.97	120.29	6	4
1	B	30	VAL	CA-C-N	7.51	132.94	120.62	5	3
1	B	30	VAL	C-N-CA	7.51	132.94	120.62	5	3
1	A	22	ILE	CA-C-N	7.51	133.59	123.00	14	4
1	A	22	ILE	C-N-CA	7.51	133.59	123.00	14	4
1	A	57	LYS	CA-C-N	7.49	133.26	122.85	11	1
1	A	57	LYS	C-N-CA	7.49	133.26	122.85	11	1
1	A	84	LYS	CA-C-N	7.49	132.02	121.24	7	1
1	A	84	LYS	C-N-CA	7.49	132.02	121.24	7	1
1	B	87	VAL	CA-C-O	-7.48	114.64	121.97	10	1
1	B	29	LEU	CA-C-N	7.47	131.42	120.74	5	6
1	B	29	LEU	C-N-CA	7.47	131.42	120.74	5	6
1	B	43	ALA	N-CA-C	7.47	126.71	110.80	6	1
1	A	12	TYR	CA-C-N	7.47	130.15	120.44	8	3
1	A	12	TYR	C-N-CA	7.47	130.15	120.44	8	3
1	B	59	VAL	CA-C-N	7.47	132.72	122.19	8	1
1	B	59	VAL	C-N-CA	7.47	132.72	122.19	8	1
1	A	81	LYS	CA-C-N	7.46	133.97	122.11	6	2
1	A	81	LYS	C-N-CA	7.46	133.97	122.11	6	2
1	B	90	ILE	N-CA-C	-7.46	103.58	110.82	6	2
1	A	27	ILE	CA-C-O	7.46	128.52	120.47	14	1
1	B	92	THR	CA-CB-OG1	-7.45	98.42	109.60	10	1
1	A	49	ARG	NE-CZ-NH2	-7.45	112.50	119.20	11	2
1	B	45	THR	CA-C-N	7.38	129.04	122.47	3	1
1	B	45	THR	C-N-CA	7.38	129.04	122.47	3	1
1	B	20	THR	CA-C-O	7.37	128.41	118.38	9	1
1	B	30	VAL	CA-C-O	-7.37	113.29	120.95	15	1
1	B	20	THR	OG1-CB-CG2	-7.36	94.58	109.30	9	1
1	B	51	PHE	CA-C-N	7.35	135.57	121.54	7	4
1	B	51	PHE	C-N-CA	7.35	135.57	121.54	7	4
1	A	18	ASP	CA-C-N	7.35	130.43	120.44	12	1
1	A	18	ASP	C-N-CA	7.35	130.43	120.44	12	1
1	B	51	PHE	CA-C-O	-7.34	112.26	120.70	12	1
1	A	45	THR	CB-CA-C	7.34	125.02	110.42	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	26	ASP	CA-CB-CG	7.33	119.93	112.60	5	5
1	A	13	LEU	CA-C-N	7.33	131.45	120.31	14	1
1	A	13	LEU	C-N-CA	7.33	131.45	120.31	14	1
1	B	35	GLN	CA-C-O	7.33	128.19	120.42	10	1
1	A	60	THR	CB-CA-C	7.32	121.42	110.14	11	4
1	A	4	ILE	CB-CA-C	7.32	121.02	110.33	15	1
1	B	58	LEU	CA-C-N	7.32	133.11	122.94	6	1
1	B	58	LEU	C-N-CA	7.32	133.11	122.94	6	1
1	A	94	ALA	CB-CA-C	7.29	124.28	110.35	3	1
1	B	31	VAL	N-CA-C	7.29	118.01	110.36	2	1
1	A	22	ILE	N-CA-C	-7.28	106.80	113.71	8	1
1	A	26	ASP	CA-C-N	7.27	131.96	120.47	9	6
1	A	26	ASP	C-N-CA	7.27	131.96	120.47	9	6
1	B	51	PHE	CA-CB-CG	7.26	121.06	113.80	5	3
1	B	15	GLU	N-CA-CB	-7.25	99.47	109.98	13	1
1	A	35	GLN	O-C-N	-7.25	112.72	122.43	8	1
1	B	89	LYS	CA-C-N	7.25	129.76	120.70	10	4
1	B	89	LYS	C-N-CA	7.25	129.76	120.70	10	4
1	B	28	ARG	NE-CZ-NH2	-7.25	112.68	119.20	6	1
1	B	59	VAL	O-C-N	-7.24	115.35	123.10	6	2
1	A	28	ARG	NE-CZ-NH2	7.23	125.71	119.20	15	2
1	A	40	LYS	CA-C-N	7.22	130.27	120.38	9	3
1	A	40	LYS	C-N-CA	7.22	130.27	120.38	9	3
1	B	16	MET	CB-CA-C	7.20	121.22	110.14	7	2
1	A	34	LEU	CA-C-O	7.19	128.22	120.24	5	3
1	B	18	ASP	CA-C-N	7.17	135.23	121.54	3	7
1	B	18	ASP	C-N-CA	7.17	135.23	121.54	3	7
1	A	33	SER	N-CA-C	7.17	120.00	111.33	2	4
1	A	60	THR	CA-CB-OG1	7.17	120.35	109.60	6	1
1	B	85	LEU	CA-C-N	7.16	132.29	121.40	10	1
1	B	85	LEU	C-N-CA	7.16	132.29	121.40	10	1
1	B	10	ALA	CA-C-N	7.15	130.18	120.38	14	2
1	B	10	ALA	C-N-CA	7.15	130.18	120.38	14	2
1	A	33	SER	CA-C-N	7.13	130.17	120.54	12	6
1	A	33	SER	C-N-CA	7.13	130.17	120.54	12	6
1	B	54	GLY	N-CA-C	-7.12	102.76	112.52	4	1
1	A	52	ASP	CB-CA-C	7.11	124.56	110.42	6	4
1	B	13	LEU	CA-C-N	7.10	130.10	120.44	13	2
1	B	13	LEU	C-N-CA	7.10	130.10	120.44	13	2
1	B	21	ASN	N-CA-C	-7.10	103.15	111.03	13	3
1	B	29	LEU	N-CA-CB	-7.09	99.64	110.20	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	39	ALA	CA-C-O	-7.08	112.27	120.20	1	1
1	B	50	LEU	CA-C-N	7.07	131.48	121.02	12	3
1	B	50	LEU	C-N-CA	7.07	131.48	121.02	12	3
1	B	30	VAL	N-CA-C	7.07	117.58	110.23	11	1
1	B	5	LYS	CA-C-N	7.06	132.41	121.19	4	5
1	B	5	LYS	C-N-CA	7.06	132.41	121.19	4	5
1	A	50	LEU	CA-C-O	-7.05	113.00	120.40	10	1
1	B	48	VAL	O-C-N	-7.04	114.94	122.83	1	2
1	B	55	LYS	CA-C-N	7.03	133.48	122.94	6	1
1	B	55	LYS	C-N-CA	7.03	133.48	122.94	6	1
1	A	39	ALA	CA-C-N	7.01	129.98	120.38	3	2
1	A	39	ALA	C-N-CA	7.01	129.98	120.38	3	2
1	A	17	ALA	N-CA-C	7.01	122.94	111.37	12	2
1	A	10	ALA	N-CA-C	7.00	119.51	111.11	14	1
1	B	84	LYS	N-CA-CB	-7.00	99.11	111.08	1	2
1	A	25	GLN	CG-CD-NE2	6.98	126.87	116.40	6	1
1	A	93	ASP	CB-CA-C	6.98	122.43	109.86	10	1
1	A	51	PHE	CA-C-N	6.98	134.86	121.54	1	5
1	A	51	PHE	C-N-CA	6.98	134.86	121.54	1	5
1	A	42	LEU	CA-C-N	6.95	129.47	120.44	13	2
1	A	42	LEU	C-N-CA	6.95	129.47	120.44	13	2
1	B	49	ARG	NE-CZ-NH1	-6.94	114.56	121.50	1	1
1	B	18	ASP	CB-CA-C	6.93	124.21	110.42	14	4
1	B	45	THR	N-CA-CB	6.93	122.20	110.49	10	3
1	A	47	GLU	CA-C-O	-6.92	113.17	120.58	2	1
1	A	59	VAL	CA-C-O	-6.92	113.17	120.57	7	1
1	B	23	LYS	CA-C-N	6.91	130.27	120.53	2	4
1	B	23	LYS	C-N-CA	6.91	130.27	120.53	2	4
1	B	20	THR	CA-CB-OG1	6.90	119.95	109.60	13	2
1	A	41	GLU	CA-C-N	6.86	129.48	120.28	13	1
1	A	41	GLU	C-N-CA	6.86	129.48	120.28	13	1
1	A	44	THR	CA-C-N	6.86	132.51	122.63	1	5
1	A	44	THR	C-N-CA	6.86	132.51	122.63	1	5
1	B	88	SER	N-CA-CB	-6.85	100.98	110.29	15	1
1	A	49	ARG	NE-CZ-NH1	6.85	128.35	121.50	1	1
1	B	24	VAL	O-C-N	-6.83	114.79	121.90	5	1
1	A	53	ILE	CB-CA-C	6.82	117.91	111.44	6	1
1	A	14	LYS	CA-C-N	6.81	129.41	120.28	1	1
1	A	14	LYS	C-N-CA	6.81	129.41	120.28	1	1
1	A	44	THR	CA-CB-OG1	6.80	119.81	109.60	8	2
1	B	57	LYS	CA-C-O	-6.80	113.96	121.23	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	2	ALA	CA-C-O	6.78	128.33	120.80	11	1
1	B	93	ASP	CA-C-N	6.78	129.36	120.28	5	4
1	B	93	ASP	C-N-CA	6.78	129.36	120.28	5	4
1	B	49	ARG	NE-CZ-NH2	-6.78	113.10	119.20	7	3
1	B	61	THR	CA-C-N	6.78	129.86	120.65	13	3
1	B	61	THR	C-N-CA	6.78	129.86	120.65	13	3
1	B	87	VAL	CA-CB-CG2	6.78	121.92	110.40	14	2
1	A	28	ARG	CA-C-N	6.77	129.24	120.44	7	5
1	A	28	ARG	C-N-CA	6.77	129.24	120.44	7	5
1	A	89	LYS	N-CA-C	6.77	121.14	112.34	7	2
1	A	21	ASN	OD1-CG-ND2	-6.77	115.83	122.60	2	2
1	A	86	THR	CA-C-O	6.77	128.41	120.70	2	1
1	B	60	THR	CA-C-N	6.77	131.10	121.42	11	2
1	B	60	THR	C-N-CA	6.77	131.10	121.42	11	2
1	A	51	PHE	O-C-N	-6.76	114.61	122.93	12	1
1	A	52	ASP	CA-C-O	6.76	125.76	119.00	12	1
1	A	31	VAL	N-CA-C	6.74	117.50	110.62	4	1
1	A	93	ASP	CA-C-N	6.74	134.42	121.54	2	2
1	A	93	ASP	C-N-CA	6.74	134.42	121.54	2	2
1	A	94	ALA	CA-C-N	6.73	132.24	121.95	6	3
1	A	94	ALA	C-N-CA	6.73	132.24	121.95	6	3
1	B	27	ILE	O-C-N	6.71	128.64	121.87	9	1
1	A	95	VAL	CA-C-N	6.71	134.35	121.54	1	3
1	A	95	VAL	C-N-CA	6.71	134.35	121.54	1	3
1	B	17	ALA	CA-C-N	6.70	134.33	121.54	5	2
1	B	17	ALA	C-N-CA	6.70	134.33	121.54	5	2
1	B	33	SER	CB-CA-C	6.69	119.57	109.13	15	1
1	B	47	GLU	O-C-N	-6.68	114.71	123.13	7	1
1	B	32	THR	CB-CA-C	6.68	121.24	109.75	15	3
1	B	14	LYS	N-CA-C	6.68	118.56	111.28	3	2
1	A	55	LYS	N-CA-C	6.67	117.08	108.34	11	4
1	B	42	LEU	CA-C-N	6.67	134.28	121.54	3	2
1	B	42	LEU	C-N-CA	6.67	134.28	121.54	3	2
1	B	26	ASP	CA-CB-CG	6.67	119.27	112.60	13	4
1	A	95	VAL	CB-CA-C	6.66	120.79	111.40	7	5
1	A	39	ALA	N-CA-C	6.65	120.27	111.75	11	1
1	A	88	SER	CA-C-N	6.64	130.07	120.38	6	4
1	A	88	SER	C-N-CA	6.64	130.07	120.38	6	4
1	B	59	VAL	CA-CB-CG2	6.64	121.68	110.40	9	1
1	A	98	HIS	ND1-CG-CD2	6.63	112.73	106.10	12	4
1	B	48	VAL	CA-CB-CG1	6.63	121.67	110.40	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	18	ASP	CA-CB-CG	6.63	119.23	112.60	7	1
1	B	38	LEU	CA-C-N	6.63	130.38	120.31	10	3
1	B	38	LEU	C-N-CA	6.63	130.38	120.31	10	3
1	B	46	GLY	CA-C-N	6.63	132.06	122.85	13	1
1	B	46	GLY	C-N-CA	6.63	132.06	122.85	13	1
1	A	53	ILE	N-CA-C	-6.62	105.87	111.56	6	3
1	A	83	ILE	CA-CB-CG2	6.61	121.74	110.50	12	1
1	B	87	VAL	O-C-N	-6.61	115.81	122.62	7	2
1	A	34	LEU	O-C-N	6.61	128.97	122.09	8	2
1	B	24	VAL	CA-C-N	6.61	129.03	120.44	2	2
1	B	24	VAL	C-N-CA	6.61	129.03	120.44	2	2
1	B	61	THR	CA-C-O	-6.59	113.34	120.92	15	1
1	B	58	LEU	N-CA-C	-6.58	101.22	110.50	3	1
1	A	11	GLU	N-CA-C	6.57	120.40	112.38	5	3
1	B	7	LEU	CA-C-N	6.57	129.41	120.54	4	3
1	B	7	LEU	C-N-CA	6.57	129.41	120.54	4	3
1	A	42	LEU	N-CA-C	6.56	118.43	111.28	1	1
1	B	15	GLU	CB-CA-C	-6.55	98.09	110.67	2	1
1	B	95	VAL	CA-C-N	6.53	131.05	120.60	15	2
1	B	95	VAL	C-N-CA	6.53	131.05	120.60	15	2
1	B	40	LYS	N-CA-C	6.53	121.08	113.18	12	3
1	A	24	VAL	CB-CA-C	6.51	121.96	111.29	12	4
1	A	96	ASP	CB-CA-C	6.49	123.34	110.42	1	2
1	A	37	VAL	CA-CB-CG1	6.49	121.44	110.40	6	5
1	A	38	LEU	N-CA-C	-6.49	103.70	111.69	2	3
1	A	98	HIS	CA-C-N	6.49	133.39	121.70	6	3
1	A	98	HIS	C-N-CA	6.49	133.39	121.70	6	3
1	B	95	VAL	CB-CA-C	6.49	117.53	111.30	15	2
1	B	50	LEU	N-CA-C	-6.45	99.23	109.23	2	2
1	B	44	THR	CB-CA-C	6.45	122.45	111.35	9	4
1	B	43	ALA	N-CA-CB	-6.45	99.95	110.14	11	1
1	B	48	VAL	N-CA-CB	-6.45	104.31	111.66	12	2
1	B	39	ALA	CA-C-N	6.45	130.11	120.31	11	3
1	B	39	ALA	C-N-CA	6.45	130.11	120.31	11	3
1	B	25	GLN	CA-C-N	6.43	128.80	120.44	9	2
1	B	25	GLN	C-N-CA	6.43	128.80	120.44	9	2
1	B	2	ALA	O-C-N	-6.43	115.67	123.19	11	1
1	A	86	THR	CB-CA-C	6.42	121.98	109.33	13	2
1	A	56	PHE	CA-CB-CG	-6.42	107.38	113.80	14	1
1	B	48	VAL	CA-C-N	6.42	131.57	122.72	5	3
1	B	48	VAL	C-N-CA	6.42	131.57	122.72	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	36	LYS	CA-C-N	6.41	128.86	120.60	4	2
1	A	36	LYS	C-N-CA	6.41	128.86	120.60	4	2
1	A	92	THR	O-C-N	-6.40	114.08	122.59	8	4
1	A	32	THR	CA-C-N	6.40	129.49	120.28	15	2
1	A	32	THR	C-N-CA	6.40	129.49	120.28	15	2
1	B	3	LYS	N-CA-C	6.39	119.51	110.50	4	1
1	B	86	THR	CA-CB-CG2	6.38	121.35	110.50	12	2
1	A	49	ARG	CD-NE-CZ	6.36	133.31	124.40	5	3
1	B	36	LYS	CA-C-N	6.36	128.69	120.56	3	1
1	B	36	LYS	C-N-CA	6.36	128.69	120.56	3	1
1	A	91	LEU	CB-CA-C	6.31	121.58	110.35	7	2
1	B	92	THR	CA-CB-CG2	6.30	121.22	110.50	2	2
1	A	31	VAL	CA-CB-CG1	6.29	121.09	110.40	7	1
1	A	7	LEU	CA-C-N	6.28	133.54	121.54	8	2
1	A	7	LEU	C-N-CA	6.28	133.54	121.54	8	2
1	B	96	ASP	CA-C-O	6.28	126.62	119.27	10	1
1	B	81	LYS	O-C-N	6.28	130.21	123.56	7	1
1	A	21	ASN	CB-CA-C	6.27	117.25	109.16	11	3
1	A	83	ILE	N-CA-C	-6.27	100.69	109.21	4	1
1	B	61	THR	N-CA-C	-6.26	99.49	109.76	12	3
1	B	50	LEU	O-C-N	-6.26	115.95	123.03	7	1
1	A	32	THR	N-CA-CB	-6.26	100.66	110.30	3	1
1	A	49	ARG	CA-C-N	6.26	131.81	123.05	11	2
1	A	49	ARG	C-N-CA	6.26	131.81	123.05	11	2
1	A	46	GLY	CA-C-N	6.25	132.77	121.89	15	2
1	A	46	GLY	C-N-CA	6.25	132.77	121.89	15	2
1	A	92	THR	CB-CA-C	6.25	121.47	110.35	4	2
1	A	60	THR	CA-C-N	6.25	131.62	123.00	7	2
1	A	60	THR	C-N-CA	6.25	131.62	123.00	7	2
1	A	40	LYS	N-CA-CB	-6.25	100.86	110.42	12	1
1	A	98	HIS	CA-CB-CG	6.25	120.05	113.80	3	1
1	A	47	GLU	O-C-N	6.24	130.05	123.06	10	1
1	A	16	MET	N-CA-C	6.24	118.08	111.28	1	2
1	B	22	ILE	N-CA-C	-6.24	98.00	107.73	5	2
1	B	94	ALA	N-CA-C	6.23	118.07	111.28	13	2
1	A	91	LEU	N-CA-C	6.22	118.38	110.61	8	1
1	A	22	ILE	CA-CB-CG2	6.22	121.08	110.50	15	1
1	A	81	LYS	N-CA-C	6.21	118.74	108.99	15	1
1	B	19	GLU	CB-CA-C	6.21	122.77	110.42	10	1
1	B	97	SER	O-C-N	-6.20	115.79	123.04	1	1
1	B	24	VAL	N-CA-C	6.20	116.94	110.62	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	17	ALA	CA-C-O	-6.19	112.25	119.24	6	1
1	B	95	VAL	N-CA-C	-6.17	106.20	113.42	9	1
1	A	37	VAL	CA-C-N	6.15	130.05	120.82	9	2
1	A	37	VAL	C-N-CA	6.15	130.05	120.82	9	2
1	B	45	THR	CB-CA-C	6.14	122.65	110.42	10	4
1	A	50	LEU	CA-C-N	6.11	132.46	122.07	15	2
1	A	50	LEU	C-N-CA	6.11	132.46	122.07	15	2
1	B	88	SER	O-C-N	6.10	129.80	122.85	1	1
1	A	98	HIS	CE1-NE2-CD2	-6.10	102.90	109.00	13	2
1	B	87	VAL	CA-CB-CG1	6.09	120.76	110.40	7	1
1	B	6	SER	CB-CA-C	6.09	120.94	110.84	4	1
1	A	38	LEU	CA-C-N	6.08	129.25	120.38	9	3
1	A	38	LEU	C-N-CA	6.08	129.25	120.38	9	3
1	B	29	LEU	CA-C-O	-6.08	114.05	120.55	9	1
1	B	40	LYS	N-CA-CB	-6.07	100.87	110.22	8	1
1	B	95	VAL	CA-CB-CG2	6.07	120.71	110.40	8	1
1	A	9	ALA	CB-CA-C	-6.06	97.89	109.95	8	1
1	B	26	ASP	CB-CA-C	-6.05	99.62	110.70	14	1
1	A	92	THR	CA-CB-CG2	6.05	120.78	110.50	3	2
1	B	97	SER	CA-C-N	6.04	130.06	121.42	1	3
1	B	97	SER	C-N-CA	6.04	130.06	121.42	1	3
1	B	83	ILE	N-CA-CB	-6.04	104.14	110.72	14	1
1	B	84	LYS	CA-C-O	-6.03	114.32	120.71	5	1
1	B	8	SER	N-CA-C	-6.01	104.30	111.69	6	3
1	A	20	THR	CA-CB-OG1	6.00	118.61	109.60	8	1
1	B	42	LEU	N-CA-CB	-6.00	101.05	110.30	1	1
1	B	41	GLU	N-CA-CB	-6.00	99.86	110.42	5	1
1	B	80	GLY	O-C-N	-6.00	114.90	122.70	10	1
1	A	47	GLU	CA-C-N	6.00	129.19	122.59	6	1
1	A	47	GLU	C-N-CA	6.00	129.19	122.59	6	1
1	B	56	PHE	CA-C-O	5.99	128.97	121.66	11	1
1	A	90	ILE	CA-CB-CG1	5.99	120.58	110.40	5	1
1	A	19	GLU	CA-C-O	-5.99	114.71	121.00	13	2
1	A	95	VAL	CA-CB-CG1	5.98	120.57	110.40	5	1
1	A	96	ASP	N-CA-C	5.98	123.53	110.80	11	1
1	A	35	GLN	OE1-CD-NE2	-5.97	116.63	122.60	7	1
1	A	5	LYS	O-C-N	5.95	129.60	122.94	3	1
1	B	52	ASP	N-CA-CB	5.95	120.54	110.49	5	4
1	A	36	LYS	N-CA-C	5.95	118.53	111.33	13	1
1	A	27	ILE	CA-CB-CG2	5.94	120.59	110.50	4	1
1	A	49	ARG	N-CA-C	5.93	118.77	107.75	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	33	SER	CA-C-N	5.93	128.54	120.54	5	3
1	B	33	SER	C-N-CA	5.93	128.54	120.54	5	3
1	A	51	PHE	N-CA-CB	-5.92	101.03	109.85	12	1
1	A	28	ARG	CD-NE-CZ	5.91	132.68	124.40	15	1
1	B	25	GLN	OE1-CD-NE2	-5.90	116.70	122.60	6	1
1	B	97	SER	CB-CA-C	5.90	119.64	110.67	4	1
1	B	51	PHE	N-CA-C	5.89	118.77	110.23	5	1
1	B	58	LEU	O-C-N	-5.88	116.37	123.13	15	3
1	A	11	GLU	O-C-N	-5.87	115.29	122.34	8	1
1	B	43	ALA	CA-C-N	5.87	132.81	121.18	3	2
1	B	43	ALA	C-N-CA	5.87	132.81	121.18	3	2
1	B	34	LEU	O-C-N	5.87	128.34	122.12	6	3
1	B	49	ARG	CA-C-O	-5.87	113.91	120.54	9	1
1	A	11	GLU	CA-C-N	5.87	128.73	120.28	4	2
1	A	11	GLU	C-N-CA	5.87	128.73	120.28	4	2
1	A	16	MET	O-C-N	-5.87	114.86	122.37	15	1
1	B	86	THR	O-C-N	-5.86	116.53	123.22	2	1
1	B	37	VAL	CA-C-N	5.86	132.73	121.54	7	2
1	B	37	VAL	C-N-CA	5.86	132.73	121.54	7	2
1	A	43	ALA	CA-C-O	5.86	126.70	119.79	11	1
1	A	29	LEU	CA-C-N	5.85	128.05	120.56	2	3
1	A	29	LEU	C-N-CA	5.85	128.05	120.56	2	3
1	B	81	LYS	CB-CA-C	5.84	119.74	109.80	4	1
1	A	90	ILE	CA-C-N	5.84	131.11	121.99	9	1
1	A	90	ILE	C-N-CA	5.84	131.11	121.99	9	1
1	A	60	THR	N-CA-C	5.84	117.96	108.26	11	1
1	B	53	ILE	CA-CB-CG2	5.84	120.43	110.50	12	1
1	B	87	VAL	CA-C-N	5.84	130.74	120.87	9	2
1	B	87	VAL	C-N-CA	5.84	130.74	120.87	9	2
1	A	34	LEU	N-CA-C	5.83	118.11	111.11	8	1
1	A	60	THR	O-C-N	-5.83	116.59	123.41	7	1
1	B	53	ILE	CA-C-O	5.83	126.93	120.46	12	2
1	A	58	LEU	CA-C-O	-5.83	114.05	120.69	8	2
1	A	92	THR	CA-CB-OG1	5.82	118.33	109.60	10	2
1	B	24	VAL	CA-CB-CG2	5.82	120.30	110.40	1	1
1	A	44	THR	CA-CB-CG2	5.82	120.40	110.50	3	1
1	A	18	ASP	N-CA-C	-5.82	105.84	113.17	6	2
1	B	49	ARG	CD-NE-CZ	5.81	132.54	124.40	11	3
1	B	25	GLN	N-CA-C	5.80	119.83	112.87	5	2
1	A	20	THR	CA-C-N	5.80	129.12	120.31	12	2
1	A	20	THR	C-N-CA	5.80	129.12	120.31	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	41	GLU	CA-C-O	-5.80	114.73	120.70	10	1
1	B	37	VAL	CA-CB-CG2	5.79	120.24	110.40	10	1
1	A	49	ARG	N-CA-CB	-5.79	101.00	110.43	14	1
1	A	21	ASN	CA-C-O	-5.78	112.24	120.51	8	1
1	A	8	SER	CB-CA-C	5.78	121.92	110.42	4	2
1	B	44	THR	CA-CB-CG2	5.78	120.32	110.50	4	2
1	A	59	VAL	O-C-N	-5.77	117.32	122.69	2	1
1	A	28	ARG	NE-CZ-NH1	-5.77	115.73	121.50	15	2
1	A	30	VAL	CA-C-O	-5.77	115.27	121.27	7	1
1	B	60	THR	CA-CB-OG1	5.76	118.25	109.60	5	3
1	B	11	GLU	CA-C-O	5.75	126.00	119.27	3	1
1	B	58	LEU	CA-C-O	-5.74	114.05	120.54	12	2
1	B	95	VAL	CA-CB-CG1	5.74	120.16	110.40	14	1
1	B	42	LEU	N-CA-C	5.72	117.52	111.28	10	1
1	A	46	GLY	N-CA-C	-5.72	101.00	110.95	2	1
1	A	97	SER	N-CA-C	5.72	119.88	113.01	6	1
1	A	94	ALA	N-CA-C	-5.72	105.61	112.58	8	1
1	A	21	ASN	O-C-N	-5.71	115.97	121.85	2	1
1	A	84	LYS	O-C-N	-5.71	116.42	123.33	5	1
1	A	45	THR	CA-CB-CG2	5.71	120.20	110.50	3	1
1	A	48	VAL	CA-C-N	5.70	130.35	122.77	8	1
1	A	48	VAL	C-N-CA	5.70	130.35	122.77	8	1
1	A	13	LEU	N-CA-C	5.70	117.57	111.36	12	1
1	A	29	LEU	N-CA-C	-5.70	105.15	111.36	12	1
1	A	24	VAL	CA-C-O	-5.69	113.67	120.78	1	1
1	B	57	LYS	CB-CA-C	5.69	120.94	109.38	3	1
1	A	84	LYS	CB-CA-C	5.69	118.55	110.24	14	1
1	B	59	VAL	N-CA-C	-5.68	100.00	108.46	12	1
1	B	9	ALA	O-C-N	5.68	128.14	122.12	14	1
1	B	31	VAL	N-CA-CB	-5.67	101.87	111.23	4	1
1	B	51	PHE	O-C-N	5.66	129.86	123.06	1	1
1	B	9	ALA	CA-C-N	5.66	130.46	121.18	15	1
1	B	9	ALA	C-N-CA	5.66	130.46	121.18	15	1
1	B	20	THR	CA-CB-CG2	5.66	120.11	110.50	7	1
1	B	32	THR	CA-CB-CG2	5.65	120.11	110.50	4	2
1	A	30	VAL	CA-C-N	5.64	130.00	120.29	1	1
1	A	30	VAL	C-N-CA	5.64	130.00	120.29	1	1
1	B	90	ILE	CA-CB-CG2	5.64	120.08	110.50	13	1
1	A	7	LEU	CA-C-O	-5.63	115.20	121.51	8	1
1	A	6	SER	CB-CA-C	5.63	121.45	110.30	4	1
1	B	25	GLN	CA-C-O	5.63	126.29	119.31	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	22	ILE	CA-C-N	5.62	131.48	121.75	2	2
1	B	22	ILE	C-N-CA	5.62	131.48	121.75	2	2
1	B	22	ILE	N-CA-CB	-5.61	104.64	111.21	6	1
1	A	55	LYS	CB-CA-C	5.61	121.88	109.94	4	1
1	B	4	ILE	CA-C-O	-5.61	115.65	121.93	11	1
1	B	39	ALA	CA-C-O	-5.60	112.50	120.51	4	1
1	A	26	ASP	N-CA-C	-5.60	106.45	113.28	12	1
1	B	11	GLU	N-CA-C	5.60	118.10	111.33	14	2
1	A	15	GLU	CA-C-N	5.60	132.23	121.54	11	2
1	A	15	GLU	C-N-CA	5.60	132.23	121.54	11	2
1	B	20	THR	O-C-N	-5.59	115.15	122.59	7	1
1	A	30	VAL	CA-CB-CG2	5.59	119.91	110.40	10	1
1	A	6	SER	N-CA-CB	-5.58	101.54	109.85	5	1
1	A	87	VAL	CA-CB-CG2	5.58	119.88	110.40	7	1
1	A	55	LYS	N-CA-CB	-5.57	101.16	111.52	4	1
1	A	87	VAL	CA-C-N	5.56	128.73	120.95	14	2
1	A	87	VAL	C-N-CA	5.56	128.73	120.95	14	2
1	B	96	ASP	CA-C-N	5.56	130.33	121.66	4	2
1	B	96	ASP	C-N-CA	5.56	130.33	121.66	4	2
1	B	94	ALA	O-C-N	-5.55	116.23	122.12	13	1
1	A	12	TYR	CA-CB-CG	5.55	123.90	113.90	15	1
1	A	33	SER	CA-CB-OG	5.55	122.20	111.10	3	1
1	A	87	VAL	CA-C-O	-5.55	114.48	120.36	3	1
1	B	90	ILE	CA-CB-CG1	5.54	119.83	110.40	14	1
1	B	47	GLU	CB-CG-CD	5.54	122.02	112.60	1	1
1	A	23	LYS	O-C-N	-5.54	116.47	123.17	6	1
1	B	23	LYS	O-C-N	-5.53	115.97	123.10	1	2
1	B	5	LYS	CA-CB-CG	5.53	125.16	114.10	8	1
1	B	6	SER	CA-C-N	5.53	128.24	120.28	10	1
1	B	6	SER	C-N-CA	5.53	128.24	120.28	10	1
1	B	60	THR	OG1-CB-CG2	-5.53	98.24	109.30	11	1
1	B	34	LEU	CA-C-O	-5.53	114.99	120.90	5	1
1	A	49	ARG	O-C-N	-5.51	116.94	123.22	11	1
1	A	98	HIS	CA-C-O	-5.51	115.61	121.78	7	1
1	B	5	LYS	CA-C-O	-5.50	114.76	120.92	8	1
1	B	85	LEU	CB-CA-C	-5.50	100.46	109.53	13	1
1	A	23	LYS	CA-C-O	-5.50	114.83	120.99	1	1
1	A	56	PHE	O-C-N	5.50	129.66	122.68	8	1
1	A	5	LYS	CA-C-N	5.49	128.63	120.95	5	2
1	A	5	LYS	C-N-CA	5.49	128.63	120.95	5	2
1	B	44	THR	CA-CB-OG1	5.48	117.83	109.60	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	47	GLU	CA-C-N	5.46	129.31	122.43	8	1
1	B	47	GLU	C-N-CA	5.46	129.31	122.43	8	1
1	A	60	THR	CA-CB-CG2	5.46	119.78	110.50	14	2
1	A	35	GLN	CA-C-O	5.45	126.29	120.24	4	1
1	B	89	LYS	N-CA-C	-5.45	105.34	111.28	4	1
1	B	97	SER	N-CA-CB	-5.45	102.33	110.17	5	1
1	B	30	VAL	CB-CA-C	5.45	120.22	111.29	6	2
1	A	39	ALA	N-CA-CB	-5.44	101.54	110.14	1	1
1	B	7	LEU	N-CA-C	5.43	119.77	113.20	2	2
1	A	19	GLU	CA-C-N	5.42	130.68	122.87	5	1
1	A	19	GLU	C-N-CA	5.42	130.68	122.87	5	1
1	B	22	ILE	CB-CA-C	-5.42	103.79	111.21	10	1
1	B	19	GLU	CA-C-N	5.41	128.44	119.35	12	3
1	B	19	GLU	C-N-CA	5.41	128.44	119.35	12	3
1	A	29	LEU	O-C-N	5.41	129.68	122.43	8	2
1	A	91	LEU	CA-C-O	5.41	125.31	119.15	13	1
1	B	59	VAL	N-CA-CB	-5.40	104.65	111.46	10	1
1	A	12	TYR	N-CA-C	-5.40	105.83	112.90	3	1
1	B	35	GLN	O-C-N	5.40	127.86	122.08	12	2
1	B	56	PHE	N-CA-C	-5.38	100.25	109.24	12	1
1	B	30	VAL	CA-CB-CG1	5.38	119.55	110.40	14	1
1	B	92	THR	OG1-CB-CG2	-5.38	98.54	109.30	14	1
1	B	28	ARG	CA-C-O	-5.38	114.72	120.42	3	1
1	A	21	ASN	CB-CG-ND2	5.35	124.42	116.40	2	1
1	A	45	THR	OG1-CB-CG2	-5.34	98.61	109.30	14	1
1	B	6	SER	O-C-N	5.34	128.47	122.22	14	1
1	B	81	LYS	CB-CG-CD	5.34	123.59	111.30	14	1
1	A	91	LEU	O-C-N	-5.34	115.89	122.25	15	1
1	A	31	VAL	CB-CA-C	5.34	119.59	112.22	14	2
1	B	16	MET	N-CA-C	5.34	116.85	110.44	3	1
1	B	4	ILE	CA-CB-CG2	5.33	119.56	110.50	1	1
1	B	33	SER	CA-C-O	-5.33	113.65	120.31	2	1
1	A	42	LEU	O-C-N	5.32	128.45	122.22	2	1
1	B	49	ARG	CA-C-N	5.31	131.06	122.29	2	1
1	B	49	ARG	C-N-CA	5.31	131.06	122.29	2	1
1	B	40	LYS	CB-CA-C	-5.31	102.51	110.90	4	1
1	B	27	ILE	CA-CB-CG2	5.31	119.52	110.50	15	1
1	B	91	LEU	CA-C-O	-5.30	114.36	120.24	5	1
1	A	87	VAL	CA-CB-CG1	5.29	119.40	110.40	15	1
1	A	25	GLN	OE1-CD-NE2	-5.29	117.31	122.60	6	1
1	B	45	THR	CA-CB-OG1	5.29	117.54	109.60	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	13	LEU	O-C-N	-5.29	114.71	122.43	4	1
1	A	25	GLN	CA-C-N	5.29	127.89	120.28	4	1
1	A	25	GLN	C-N-CA	5.29	127.89	120.28	4	1
1	A	43	ALA	N-CA-C	-5.29	106.89	113.55	9	1
1	B	94	ALA	CA-C-O	5.28	126.05	119.97	2	1
1	B	90	ILE	CB-CA-C	5.28	119.51	112.22	5	1
1	A	99	LYS	N-CA-CB	5.28	119.48	110.50	9	1
1	A	96	ASP	N-CA-CB	5.28	119.42	110.49	14	2
1	B	57	LYS	CA-C-N	5.28	129.43	122.30	15	1
1	B	57	LYS	C-N-CA	5.28	129.43	122.30	15	1
1	B	17	ALA	O-C-N	5.28	129.43	122.36	6	1
1	B	83	ILE	CA-C-O	5.28	126.87	120.85	10	1
1	B	59	VAL	CA-C-O	5.28	126.58	120.67	2	1
1	B	57	LYS	N-CA-C	5.28	116.54	108.52	11	1
1	B	7	LEU	N-CA-CB	-5.27	102.35	110.20	8	1
1	A	5	LYS	N-CA-CB	-5.27	101.73	110.47	2	1
1	B	24	VAL	CA-C-O	5.26	126.89	121.05	5	1
1	A	91	LEU	CA-C-N	5.26	128.18	119.35	15	2
1	A	91	LEU	C-N-CA	5.26	128.18	119.35	15	2
1	B	41	GLU	CA-C-O	5.26	125.99	119.79	11	1
1	A	86	THR	CA-CB-OG1	-5.25	101.72	109.60	13	1
1	A	25	GLN	CA-C-O	5.25	125.13	119.15	8	1
1	B	87	VAL	N-CA-C	5.25	117.01	109.51	4	1
1	B	36	LYS	N-CA-CB	5.24	117.92	110.16	2	1
1	B	20	THR	CA-C-N	5.24	127.76	120.63	10	1
1	B	20	THR	C-N-CA	5.24	127.76	120.63	10	1
1	A	21	ASN	CA-C-N	5.23	129.50	121.19	1	1
1	A	21	ASN	C-N-CA	5.23	129.50	121.19	1	1
1	B	60	THR	O-C-N	-5.23	117.00	123.33	2	2
1	B	48	VAL	CA-CB-CG2	5.22	119.28	110.40	1	1
1	A	15	GLU	CA-C-O	5.22	125.59	119.28	8	1
1	B	51	PHE	N-CA-CB	-5.21	101.68	110.49	9	1
1	B	36	LYS	CA-C-O	-5.20	115.03	120.55	10	1
1	A	87	VAL	N-CA-CB	-5.20	102.54	110.86	7	1
1	A	90	ILE	N-CA-C	5.19	119.36	112.76	8	1
1	B	81	LYS	CA-C-N	5.19	130.62	122.21	7	1
1	B	81	LYS	C-N-CA	5.19	130.62	122.21	7	1
1	A	51	PHE	CA-C-O	-5.19	113.09	120.51	9	1
1	B	36	LYS	N-CA-C	-5.19	105.53	111.14	13	1
1	B	11	GLU	N-CA-CB	-5.18	102.36	110.44	4	1
1	A	59	VAL	CB-CA-C	5.18	118.49	110.82	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	53	ILE	O-C-N	-5.17	116.10	122.57	1	1
1	B	91	LEU	N-CA-C	5.17	117.00	111.36	11	1
1	B	55	LYS	N-CA-C	-5.17	100.87	108.99	10	1
1	A	22	ILE	CA-CB-CG1	5.17	119.18	110.40	13	1
1	A	16	MET	CB-CA-C	-5.16	102.23	110.79	1	1
1	A	82	LYS	CA-C-N	5.15	128.07	120.91	15	1
1	A	82	LYS	C-N-CA	5.15	128.07	120.91	15	1
1	A	19	GLU	N-CA-C	-5.15	107.13	113.41	14	1
1	A	54	GLY	O-C-N	-5.14	116.01	122.70	6	1
1	A	21	ASN	N-CA-CB	5.14	118.25	110.28	12	1
1	B	17	ALA	N-CA-CB	-5.14	103.21	110.81	9	1
1	A	97	SER	CA-C-N	5.13	132.57	123.34	8	1
1	A	97	SER	C-N-CA	5.13	132.57	123.34	8	1
1	A	47	GLU	N-CA-CB	-5.13	102.05	110.41	9	1
1	A	93	ASP	N-CA-CB	5.12	120.75	111.11	4	1
1	B	14	LYS	O-C-N	-5.12	115.93	122.34	4	1
1	B	56	PHE	CB-CG-CD2	-5.12	111.99	120.70	8	1
1	A	6	SER	CA-C-N	5.12	130.25	122.11	5	1
1	A	6	SER	C-N-CA	5.12	130.25	122.11	5	1
1	B	27	ILE	N-CA-C	-5.12	107.75	111.90	3	1
1	B	41	GLU	CB-CG-CD	5.11	121.28	112.60	1	1
1	A	35	GLN	N-CA-C	-5.11	105.89	112.68	2	1
1	A	36	LYS	N-CA-CB	-5.10	102.37	110.28	3	1
1	B	57	LYS	N-CA-CB	-5.10	102.04	111.53	4	1
1	B	96	ASP	CB-CA-C	5.10	118.82	110.96	14	1
1	B	23	LYS	N-CA-C	-5.10	101.31	109.07	2	1
1	A	22	ILE	CA-C-O	-5.10	113.74	119.35	8	1
1	A	33	SER	N-CA-CB	-5.10	102.37	110.22	10	1
1	A	23	LYS	CB-CA-C	5.09	120.79	109.94	1	1
1	A	13	LEU	CA-C-O	-5.08	113.62	119.61	7	1
1	A	86	THR	CA-CB-CG2	5.07	119.12	110.50	6	1
1	A	8	SER	CA-CB-OG	-5.07	100.97	111.10	9	1
1	B	83	ILE	CA-C-N	5.06	130.52	122.62	6	1
1	B	83	ILE	C-N-CA	5.06	130.52	122.62	6	1
1	B	32	THR	CA-C-N	5.06	131.21	121.54	11	2
1	B	32	THR	C-N-CA	5.06	131.21	121.54	11	2
1	B	42	LEU	O-C-N	5.06	127.48	122.12	10	1
1	A	31	VAL	O-C-N	5.05	126.77	121.87	12	1
1	B	15	GLU	CA-C-N	5.05	128.41	121.33	15	1
1	B	15	GLU	C-N-CA	5.05	128.41	121.33	15	1
1	B	17	ALA	N-CA-C	-5.05	107.07	113.18	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	B	45	THR	OG1-CB-CG2	-5.05	99.21	109.30	13	1
1	A	48	VAL	CA-C-O	5.04	126.41	120.71	2	1
1	B	28	ARG	NE-CZ-NH1	-5.04	116.46	121.50	5	1
1	A	59	VAL	N-CA-CB	-5.04	105.55	111.60	12	1
1	B	54	GLY	CA-C-O	-5.03	116.37	121.30	7	1
1	A	88	SER	N-CA-CB	-5.03	102.80	110.45	11	1
1	A	9	ALA	N-CA-C	5.02	119.65	111.37	10	1
1	B	12	TYR	N-CA-C	5.01	119.10	112.89	3	1
1	B	21	ASN	O-C-N	-5.01	115.55	122.46	3	1
1	A	12	TYR	CA-C-O	5.01	125.76	120.10	4	1
1	A	17	ALA	CA-C-O	-5.01	115.54	120.90	8	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	12	TYR	Sidechain	6
1	B	12	TYR	Sidechain	3
1	B	18	ASP	Peptide,Mainchain	2
1	B	60	THR	Peptide	2
1	A	56	PHE	Sidechain	2
1	B	86	THR	Mainchain,Peptide	2
1	A	92	THR	Peptide	1
1	B	20	THR	Mainchain	1
1	A	98	HIS	Sidechain	1
1	A	16	MET	Mainchain	1
1	A	31	VAL	Mainchain	1
1	B	44	THR	Peptide	1
1	A	51	PHE	Sidechain	1
1	A	55	LYS	Mainchain	1
1	B	97	SER	Peptide	1
1	A	30	VAL	Mainchain	1
1	B	28	ARG	Sidechain	1
1	B	84	LYS	Peptide	1
1	A	95	VAL	Mainchain	1

6.2 Too-close contacts

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	599	658	658	1±1
1	B	608	674	674	1±1
All	All	18105	19980	19980	15

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 0.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:VAL:HG23	1:A:92:THR:HG21	0.72	1.61	6	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:92:THR:HG21	0.56	2.30	6	1
1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HD23	0.55	1.62	2	1
1:A:34:LEU:HD21	1:B:31:VAL:HG22	0.54	1.79	2	1
1:A:34:LEU:HD12	1:A:34:LEU:H	0.53	1.64	7	1
1:A:30:VAL:HG11	1:B:30:VAL:HG21	0.51	1.83	3	1
1:B:42:LEU:HD21	1:B:48:VAL:HG23	0.51	1.83	4	1
1:B:9:ALA:HA	1:B:12:TYR:CD2	0.47	2.44	9	1
1:B:90:ILE:HD12	1:B:90:ILE:H	0.47	1.70	6	2
1:A:24:VAL:HG13	1:A:25:GLN:H	0.45	1.72	1	1
1:A:88:SER:O	1:A:92:THR:HG22	0.42	2.14	6	1
1:B:9:ALA:HA	1:B:12:TYR:CE2	0.41	2.50	9	1
1:B:22:ILE:N	1:B:22:ILE:HD12	0.41	2.30	4	1
1:A:50:LEU:HB3	1:A:53:ILE:HD12	0.41	1.93	12	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	76/99 (77%)	64±2 (84±3%)	9±2 (12±3%)	3±1 (4±2%)	4	32
1	B	78/99 (79%)	66±3 (84±4%)	10±3 (13±3%)	2±1 (3±2%)	6	42
All	All	2310/2970 (78%)	1950 (84%)	288 (12%)	72 (3%)	5	37

All 23 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	96	ASP	10
1	A	52	ASP	9
1	A	24	VAL	8
1	B	19	GLU	8
1	B	45	THR	6
1	A	45	THR	6
1	B	52	ASP	4
1	B	18	ASP	4
1	A	89	LYS	3
1	A	95	VAL	1
1	B	21	ASN	1
1	B	24	VAL	1
1	B	43	ALA	1
1	A	8	SER	1
1	B	20	THR	1
1	B	33	SER	1
1	B	44	THR	1
1	A	13	LEU	1
1	B	38	LEU	1
1	B	31	VAL	1
1	A	16	MET	1
1	A	90	ILE	1
1	B	3	LYS	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	68/87 (78%)	65±2 (95±2%)	3±2 (5±2%)	25	75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	B	69/87 (79%)	67±1 (97±2%)	2±1 (3±2%)	41 88
All	All	2055/2610 (79%)	1980 (96%)	75 (4%)	32 82

All 43 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	52	ASP	11
1	A	7	LEU	4
1	A	92	THR	4
1	A	38	LEU	3
1	A	87	VAL	3
1	B	31	VAL	3
1	A	11	GLU	3
1	A	16	MET	2
1	B	30	VAL	2
1	B	50	LEU	2
1	B	91	LEU	2
1	A	37	VAL	2
1	A	58	LEU	2
1	B	85	LEU	2
1	B	53	ILE	2
1	A	84	LYS	1
1	B	13	LEU	1
1	B	21	ASN	1
1	A	90	ILE	1
1	B	23	LYS	1
1	B	59	VAL	1
1	A	53	ILE	1
1	A	59	VAL	1
1	A	83	ILE	1
1	B	92	THR	1
1	B	96	ASP	1
1	A	19	GLU	1
1	A	45	THR	1
1	A	60	THR	1
1	A	91	LEU	1
1	B	29	LEU	1
1	B	86	THR	1
1	A	24	VAL	1
1	A	93	ASP	1
1	A	95	VAL	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	B	61	THR	1
1	B	95	VAL	1
1	B	97	SER	1
1	A	14	LYS	1
1	A	15	GLU	1
1	B	1	MET	1
1	B	45	THR	1
1	B	48	VAL	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 20% for the well-defined parts and 18% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_2*

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	503
Number of shifts mapped to atoms	503
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	92	0.52 ± 0.10	Should be checked
$^{13}\text{C}_\beta$	66	1.11 ± 0.10	Should be checked
$^{13}\text{C}'$	90	0.52 ± 0.14	Should be applied
^{15}N	92	-0.23 ± 0.41	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 20%, i.e. 434 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2198. 0 out of 36 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	363/786 (46%)	137/318 (43%)	150/312 (48%)	76/156 (49%)
Sidechain	71/1347 (5%)	4/882 (0%)	65/423 (15%)	2/42 (5%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	0/65 (0%)	0/32 (0%)	0/32 (0%)	0/1 (0%)
Overall	434/2198 (20%)	141/1232 (11%)	215/767 (28%)	78/199 (39%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 18%, i.e. 503 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2812. 0 out of 36 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	431/986 (44%)	157/398 (39%)	182/396 (46%)	92/192 (48%)
Sidechain	72/1754 (4%)	4/1144 (0%)	66/546 (12%)	2/64 (3%)
Aromatic	0/72 (0%)	0/36 (0%)	0/34 (0%)	0/2 (0%)
Overall	503/2812 (18%)	161/1578 (10%)	248/976 (25%)	94/258 (36%)

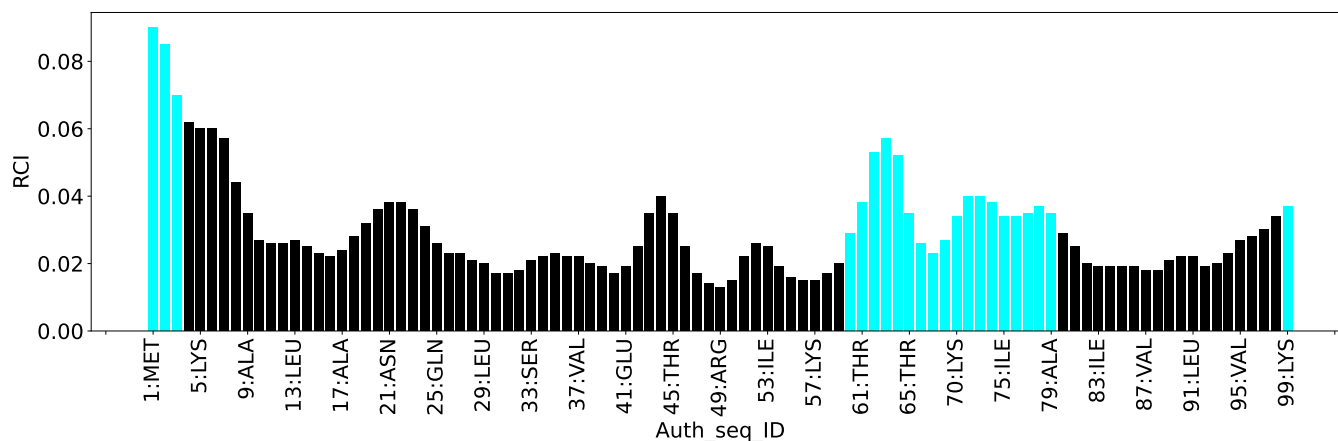
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



7.2 Chemical shift list 2

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *MGal_BMRB.tab*

7.2.1 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	508
Number of shifts mapped to atoms	508
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.2.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	94	0.52 ± 0.13	Should be checked
$^{13}\text{C}_\beta$	66	1.11 ± 0.13	Should be checked
$^{13}\text{C}'$	91	0.56 ± 0.17	Should be applied
^{15}N	92	-0.35 ± 0.49	None needed (< 0.5 ppm)

7.2.3 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 20%, i.e. 433 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2198. 0 out of 36 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	362/786 (46%)	137/318 (43%)	150/312 (48%)	75/156 (48%)
Sidechain	71/1347 (5%)	4/882 (0%)	65/423 (15%)	2/42 (5%)
Aromatic	0/65 (0%)	0/32 (0%)	0/32 (0%)	0/1 (0%)
Overall	433/2198 (20%)	141/1232 (11%)	215/767 (28%)	77/199 (39%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 18%, i.e. 508 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2812. 0 out of 36 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	436/986 (44%)	159/398 (40%)	185/396 (47%)	92/192 (48%)
Sidechain	72/1754 (4%)	4/1144 (0%)	66/546 (12%)	2/64 (3%)
Aromatic	0/72 (0%)	0/36 (0%)	0/34 (0%)	0/2 (0%)
Overall	508/2812 (18%)	163/1578 (10%)	251/976 (26%)	94/258 (36%)

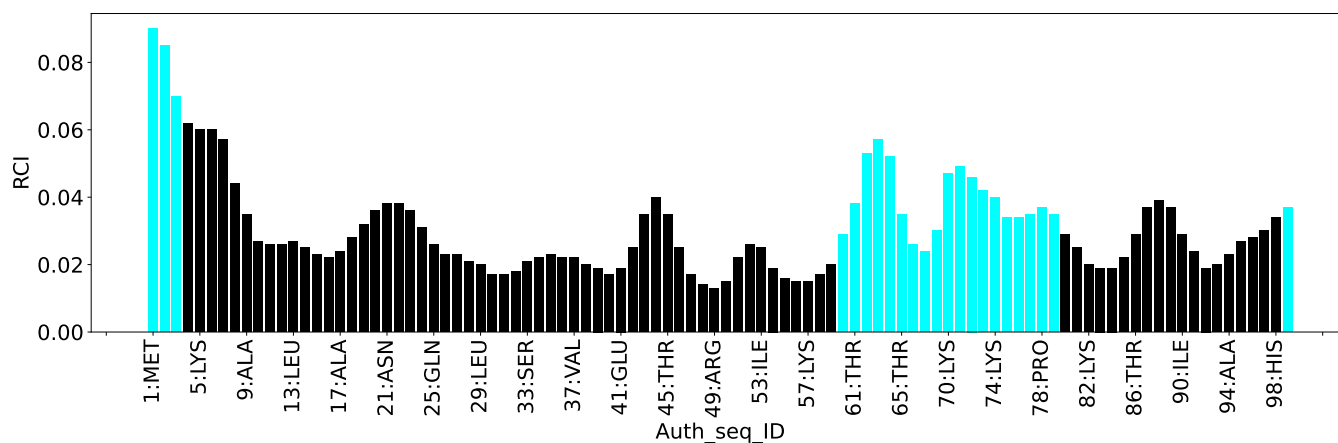
7.2.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis [i](#)

8.1 Conformationally restricting restraints [i](#)

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

Description	Value
Total distance restraints	0
Intra-residue ($ i-j =0$)	0
Sequential ($ i-j =1$)	0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	0
Long range ($ i-j \geq 5$)	0
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	310
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	0
Number of long range restraints per residue ¹	0

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

8.2 Residual restraint violations [i](#)

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

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

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

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model [i](#)

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation.

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	63.6	9.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
10.0-20.0 (Medium)	46.9	20.0
>20.0 (Large)	115.0	173.4

9 Distance violation analysis ⓘ

No distance restraints data found

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

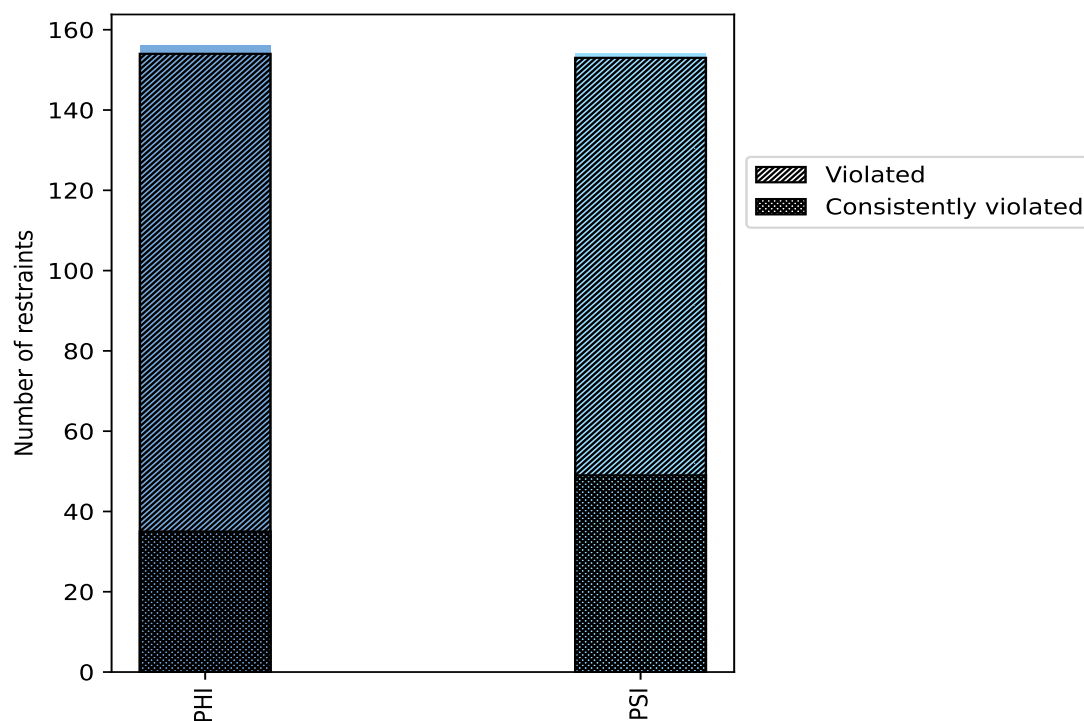
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	156	50.3	154	98.7	49.7	35	22.4	11.3
PSI	154	49.7	153	99.4	49.4	49	31.8	15.8
Total	310	100.0	307	99.0	99.0	84	27.1	27.1

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

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



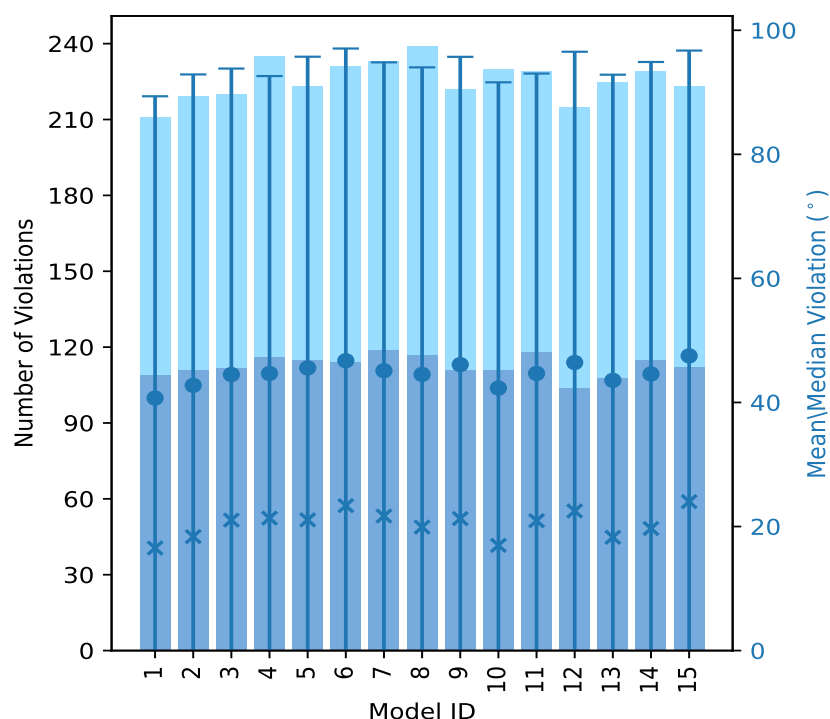
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	109	102	211	40.71	170.05	48.65	16.53
2	111	108	219	42.75	167.31	50.13	18.37
3	112	108	220	44.51	167.07	49.32	21.04
4	116	119	235	44.67	172.51	47.95	21.36
5	115	108	223	45.57	171.71	50.17	21.08
6	114	117	231	46.73	172.38	50.33	23.37
7	119	114	233	45.11	169.79	49.72	21.69
8	117	122	239	44.52	173.4	49.5	19.91
9	111	111	222	46.1	169.83	49.62	21.28
10	111	119	230	42.32	171.93	49.29	16.96
11	118	111	229	44.68	165.71	48.35	20.94
12	104	111	215	46.44	164.99	50.1	22.51
13	108	117	225	43.56	169.95	49.28	18.27
14	115	114	229	44.59	165.13	50.3	19.68
15	112	111	223	47.51	163.47	49.22	24.02

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

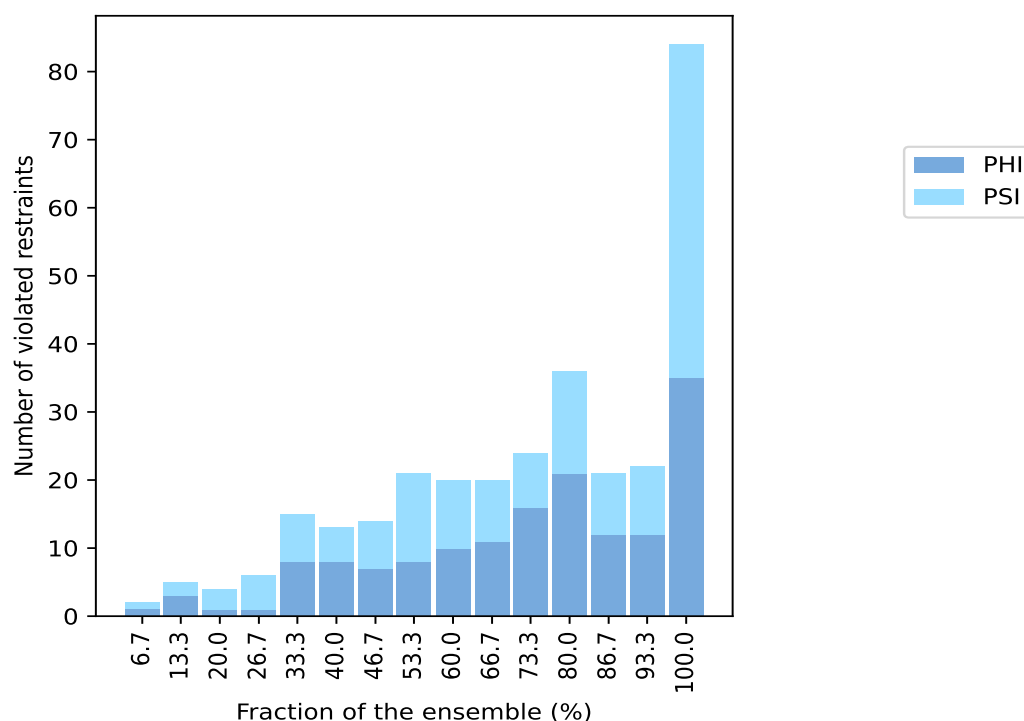
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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 ¹	%
1	1	2	1	6.7
3	2	5	2	13.3
1	3	4	3	20.0
1	5	6	4	26.7
8	7	15	5	33.3
8	5	13	6	40.0
7	7	14	7	46.7
8	13	21	8	53.3
10	10	20	9	60.0
11	9	20	10	66.7
16	8	24	11	73.3
21	15	36	12	80.0
12	9	21	13	86.7
12	10	22	14	93.3
35	49	84	15	100.0

¹ Number of models with violations

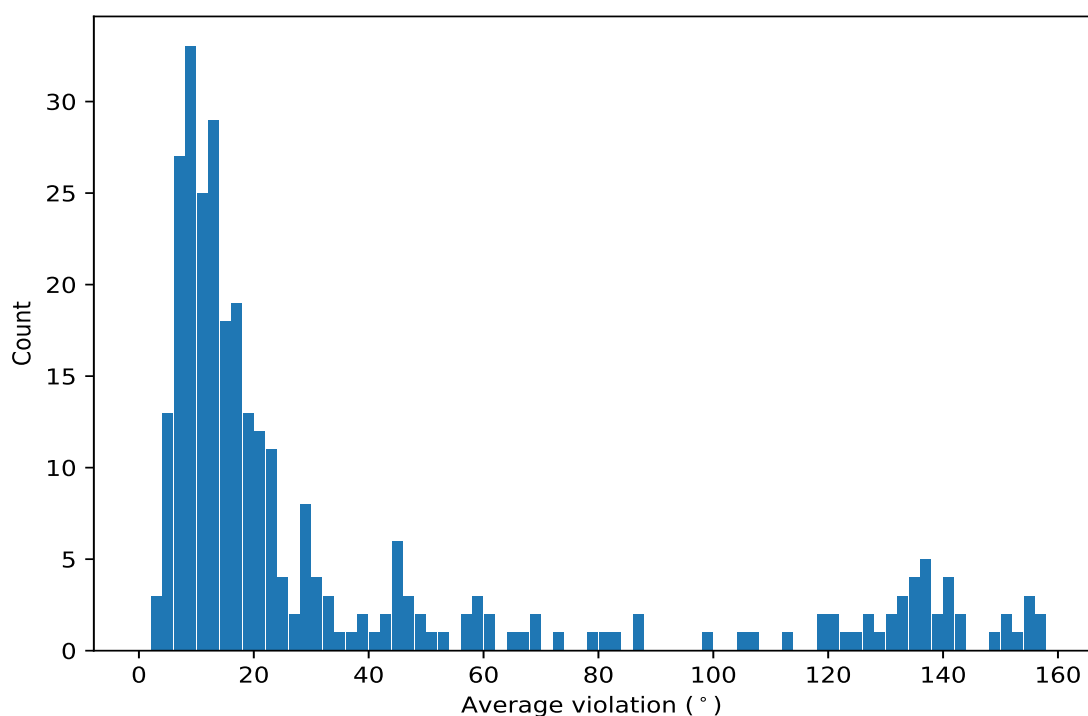
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	15	156.86	11.52	157.56
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	15	156.12	7.06	159.8
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	15	155.6	17.4	156.94
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	15	155.12	6.3	157.69
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	15	154.64	10.49	157.89
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	15	152.94	10.25	150.09
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	15	150.37	9.35	148.66
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	15	150.04	34.97	161.98
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	15	148.15	9.09	147.62
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	15	143.92	10.19	146.01
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	15	143.8	17.16	146.01
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	15	141.98	8.29	141.74
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	15	141.48	10.8	142.36
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	15	140.77	7.77	144.29
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	15	140.32	32.4	146.89
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	15	138.56	8.17	139.61
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	15	136.81	13.36	137.5
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	15	136.57	12.44	133.97
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	15	136.52	6.2	136.93
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	15	136.45	25.31	143.1
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	15	136.16	17.3	135.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	15	135.91	13.93	135.97
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	15	135.76	4.62	135.38
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	15	134.86	12.0	130.56
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	15	134.68	17.55	137.53
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	15	133.64	8.52	131.17
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	15	133.34	26.98	134.53
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	15	132.58	7.79	131.12
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	15	131.78	10.36	132.85
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	15	131.34	16.52	130.78
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	15	129.59	11.15	134.08
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	15	126.95	25.37	130.97
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	15	126.95	14.36	127.97
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	15	125.39	10.47	122.9
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	15	123.8	12.13	122.94
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	15	121.98	20.43	134.54
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	15	121.67	19.78	123.65
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	15	119.19	18.68	120.77
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	15	118.27	15.15	117.0
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	15	113.98	13.96	117.57
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	15	106.11	15.71	102.55
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	15	104.48	48.96	132.47
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	15	86.77	32.79	94.26
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	15	86.08	27.93	84.92
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	15	83.67	9.06	83.68
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	15	81.49	8.41	80.44
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	15	78.92	16.4	76.2
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	15	73.14	22.44	75.93
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	15	69.86	12.85	72.48
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	15	68.25	14.41	73.9
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	15	66.25	28.92	78.43
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	15	64.16	15.19	64.22
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	15	61.98	10.23	59.07
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	15	60.9	25.86	71.39
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	15	58.6	35.38	53.94
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	15	57.54	21.35	65.13
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	15	52.13	26.45	58.45
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	15	48.82	17.14	52.54
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	15	48.11	8.84	45.48
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	15	47.84	41.47	36.24
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	15	46.34	17.55	50.01
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	15	45.84	15.33	48.9
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	15	45.52	8.19	44.64
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	15	45.24	12.99	40.03
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	15	44.34	20.02	43.58
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	15	43.52	15.46	48.12
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	15	31.22	10.4	29.22
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	15	29.54	8.19	30.24
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	15	29.16	4.61	28.84
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	15	28.82	13.27	27.38
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	15	28.78	10.44	28.68
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	15	26.6	15.69	22.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	15	25.73	13.56	21.56
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	15	25.34	8.29	22.56
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	15	24.8	9.21	22.82
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	15	22.95	10.77	20.52
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	15	22.79	7.88	18.96
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	15	22.75	15.67	26.1
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	15	22.14	7.69	24.36
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	15	19.91	6.19	18.22
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	15	19.47	12.43	19.8
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	15	18.91	11.15	15.29
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	15	10.22	6.96	8.56
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	15	9.59	5.38	8.59
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	14	59.18	15.5	60.55
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	14	50.23	10.54	51.72
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	14	46.17	17.46	47.74
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	14	44.14	15.46	45.37
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	14	41.53	23.38	45.58
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	14	38.99	14.37	42.96
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	14	36.21	17.86	37.32
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	14	34.32	26.98	29.01
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	14	30.4	30.01	16.84
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	14	28.8	14.25	27.24
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	14	25.64	16.19	24.54
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	14	22.23	12.84	20.51
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	14	21.93	12.39	22.28
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	14	21.73	9.29	22.96
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	14	21.25	10.04	21.56
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	14	18.08	7.7	16.55
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	14	16.71	8.37	16.61
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	14	16.14	8.48	13.69
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	14	15.86	10.48	16.51
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	14	13.76	7.43	12.55
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	14	11.68	5.58	11.34
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	14	11.3	9.66	7.85
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	13	58.81	7.66	58.48
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	13	39.38	20.62	34.94
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	13	33.36	35.53	9.23
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	13	31.02	15.84	30.28
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	13	22.07	8.47	20.68
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	13	21.63	12.03	24.25
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	13	21.35	8.97	24.08
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	13	21.24	13.87	18.57
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	13	20.27	7.78	21.65
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	13	17.25	5.71	16.49
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	13	16.55	14.41	10.88
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	13	16.13	10.47	12.43
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	13	15.94	9.63	13.32
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	13	15.24	7.27	16.42
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	13	14.12	6.85	13.88
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	13	14.04	9.15	11.24
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	13	13.68	7.46	13.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	13	13.12	6.61	12.27
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	13	13.01	6.94	14.23
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	13	12.45	6.74	12.74
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	13	10.58	10.38	5.91
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	12	138.04	9.09	136.79
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	12	44.1	13.78	41.82
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	12	43.4	20.57	47.84
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	12	29.51	11.7	30.92
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	12	23.15	13.87	22.08
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	12	22.8	21.0	12.64
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	12	21.12	8.82	23.14
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	12	21.1	20.87	15.14
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	12	20.74	11.3	18.73
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	12	19.87	10.31	20.61
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	12	19.17	14.38	14.71
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	12	18.76	14.06	13.84
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	12	17.85	12.21	12.06
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	12	16.68	19.6	10.68
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	12	16.65	12.0	13.47
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	12	16.38	11.59	12.92
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	12	16.11	7.76	17.76
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	12	15.15	7.04	13.96
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	12	14.49	11.02	12.99
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	12	14.37	10.04	13.0
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	12	14.32	7.76	13.6
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	12	13.82	8.4	13.48
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	12	13.48	11.48	12.28
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	12	13.34	7.74	12.2
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	12	13.2	10.18	9.53
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	12	13.07	8.05	11.06
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	12	12.8	8.07	12.55
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	12	12.59	8.89	8.65
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	12	12.01	5.77	13.42
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	12	11.55	6.33	10.84
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	12	10.04	5.32	9.62
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	12	9.86	5.86	9.12
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	12	9.6	5.56	9.64
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	12	9.57	7.04	10.26
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	12	8.56	5.55	6.98
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	12	4.58	3.51	3.77
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	11	32.27	22.55	26.73
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	11	28.85	13.26	31.18
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	11	22.31	15.27	15.85
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	11	20.06	13.54	15.62
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	11	19.22	11.98	18.92
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	11	18.71	19.92	10.92
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	11	18.35	11.71	17.92
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	11	16.57	9.68	12.87
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	11	15.6	8.76	11.12
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	11	15.55	7.08	15.42
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	11	14.83	9.68	12.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	11	14.48	11.96	10.17
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	11	13.6	8.92	13.24
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	11	12.25	10.2	6.83
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	11	11.9	9.28	9.81
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	11	11.58	6.36	11.96
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	11	10.98	5.14	11.64
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	11	10.37	6.37	9.38
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	11	9.61	4.9	9.59
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	11	9.23	7.15	8.24
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	11	9.18	4.46	9.83
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	11	8.59	5.89	8.86
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	11	8.31	6.94	5.17
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	11	7.46	4.06	6.2
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	10	57.3	34.59	71.07
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	10	26.59	31.45	8.41
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	10	18.39	10.89	18.42
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	10	17.88	12.33	14.89
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	10	14.66	10.69	9.76
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	10	14.42	9.48	10.98
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	10	11.94	8.62	7.19
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	10	11.25	6.79	10.75
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	10	11.2	6.94	9.36
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	10	10.91	5.22	11.77
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	10	9.77	5.43	11.19
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	10	9.58	4.61	9.64
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	10	9.35	4.46	8.07
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	10	8.89	7.2	7.37
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	10	8.59	5.61	8.41
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	10	8.48	3.87	7.77
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	10	7.61	5.77	6.52
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	10	7.07	4.48	5.42
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	10	5.64	3.07	6.0
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	10	5.08	4.13	4.32
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	9	17.07	12.36	12.84
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	9	16.96	15.45	7.93
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	9	15.04	8.47	15.42
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	9	12.67	6.53	13.18
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	9	12.41	7.15	11.01
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	9	12.37	6.41	11.45
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	9	12.34	7.11	12.34
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	9	12.1	6.4	10.45
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	9	10.91	6.65	8.11
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	9	10.16	5.35	8.4
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	9	9.81	6.71	7.95
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	9	9.65	6.22	10.49
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	9	9.39	4.07	9.15
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	9	8.75	5.7	6.36
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	9	8.08	2.58	8.08
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	9	7.85	6.87	4.58
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	9	7.85	8.1	3.08
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	9	7.04	3.24	6.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	9	5.66	3.92	4.97
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	9	5.56	2.82	5.59
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	8	23.75	17.05	27.34
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	8	20.3	11.12	18.08
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	8	18.88	11.22	21.01
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	8	14.26	4.78	14.89
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	8	13.48	6.82	13.8
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	8	13.4	9.81	13.42
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	8	12.5	8.94	8.36
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	8	10.72	4.66	11.27
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	8	10.12	7.32	8.22
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	8	9.32	6.56	5.51
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	8	9.17	9.02	4.93
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	8	8.04	4.08	8.12
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	8	7.86	5.06	6.42
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	8	7.38	3.28	7.96
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	8	7.28	5.25	5.87
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	8	7.18	3.24	7.24
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	8	7.11	4.28	5.76
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	8	6.96	5.74	6.1
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	8	6.92	3.97	5.79
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	8	6.07	5.22	4.97
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	8	5.26	2.65	4.26
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	7	17.13	9.01	18.5
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	7	16.27	11.08	12.95
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	7	14.0	8.79	10.65
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	7	13.66	9.19	14.81
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	7	13.51	10.4	13.48
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	7	12.23	8.54	9.92
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	7	11.57	9.59	6.0
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	7	11.48	10.3	8.23
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	7	10.97	7.48	7.54
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	7	7.85	3.43	8.06
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	7	7.51	2.94	9.18
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	7	7.18	3.18	5.51
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	7	6.51	5.34	3.74
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	7	3.55	1.79	4.1
(1,217)	1:65:B:THR:C	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	6	98.22	11.0	93.26
(1,218)	1:65:A:THR:C	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	6	32.7	41.24	4.41
(1,165)	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	6	17.16	4.69	18.78
(1,222)	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	6	11.95	7.99	11.2
(1,260)	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	6	10.32	6.27	7.96
(1,212)	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	6	9.36	5.04	7.92
(1,122)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	6	8.96	5.21	6.0
(1,97)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	6	8.17	4.49	8.52
(1,157)	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	6	8.06	9.01	2.31
(1,80)	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	6	7.88	5.26	7.15
(1,6)	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	6	7.84	4.92	6.46
(1,120)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	6	3.68	2.27	3.14
(1,247)	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	6	2.7	1.88	2.1
(1,280)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	5	18.08	15.51	8.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

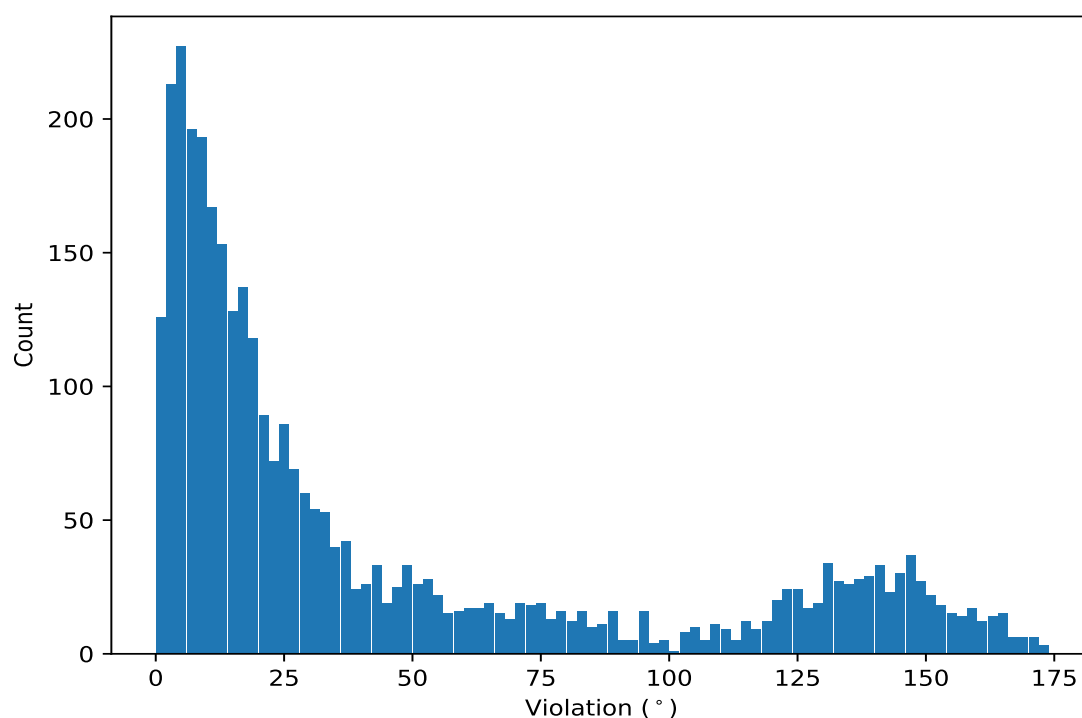
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,285)	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	5	12.39	6.37	13.43
(1,207)	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	5	10.62	4.46	8.5
(1,24)	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	5	10.27	7.54	6.87
(1,63)	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	5	9.7	9.47	5.79
(1,283)	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	5	9.31	7.89	6.84
(1,213)	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	5	8.68	4.74	9.31
(1,214)	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	5	8.28	6.07	7.23
(1,224)	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	5	7.49	8.71	3.28
(1,158)	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	5	7.33	3.87	5.73
(1,137)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	1:41:A:GLU:CA	1:41:A:GLU:C	5	5.72	2.89	5.33
(1,251)	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	5	5.47	1.52	5.61
(1,249)	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	5	5.35	3.19	4.82
(1,98)	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	5	5.02	3.87	2.66
(1,193)	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	5	4.3	1.71	4.29
(1,61)	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	4	31.2	33.01	19.46
(1,187)	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	4	29.02	9.61	29.68
(1,35)	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	4	12.9	8.63	9.13
(1,268)	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	4	8.5	5.29	6.05
(1,135)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	4	7.91	6.47	5.58
(1,39)	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	4	7.65	3.7	8.43
(1,3)	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	3	17.49	8.44	18.49
(1,281)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	3	17.13	10.62	22.87
(1,64)	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	3	7.14	4.81	7.24
(1,228)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	3	6.7	3.69	6.21
(1,66)	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	2	22.84	11.22	22.84
(1,74)	1:24:B:VAL:C	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	2	13.41	0.19	13.41
(1,195)	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	2	7.47	5.13	7.47
(1,172)	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	2	5.81	4.65	5.81
(1,250)	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	2	4.07	0.54	4.07

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints [i](#)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations [i](#)

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints [i](#)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	8	173.4
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	4	172.51
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	6	172.38
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	10	171.93
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	5	171.71
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	8	171.26
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	6	171.14
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	5	170.66
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	1	170.05
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	13	169.95
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	9	169.83
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	7	169.79
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	7	169.53
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	5	169.0
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	7	168.79
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	4	167.97
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	2	167.31
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	3	167.07
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1	166.6
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	9	166.44
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	3	166.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	2	165.82
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	11	165.71
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	8	165.69
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	8	165.68
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	11	165.58
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	14	165.13
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	12	164.99
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	14	164.9
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	14	164.68
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	14	164.53
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	6	164.48
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	5	164.41
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1	164.19
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	10	164.12
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	13	164.0
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	12	163.75
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	15	163.47
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	3	163.46
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	11	163.43
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	6	162.62
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	15	162.61
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	6	162.6
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	2	162.58
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	9	162.55
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	5	162.54
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	12	162.5
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	9	162.42
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	15	162.3
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	15	162.06
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	13	161.98
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	6	161.9
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	5	161.83
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	7	161.82
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	6	161.34
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	6	160.95
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	7	160.73
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	10	160.72
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	11	160.3
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	7	160.2
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	8	160.17
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	3	160.13
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	12	159.9
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	9	159.8
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1	159.59
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	15	159.57
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	10	159.55
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	7	159.53
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	2	159.35
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	4	159.22
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	5	159.17
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	13	159.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	2	159.07
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	12	159.01
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	10	158.68
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	4	158.57
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	10	158.19
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	6	158.18
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	11	158.01
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	2	157.96
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	12	157.91
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1	157.89
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	4	157.85
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	7	157.69
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	5	157.56
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	12	157.22
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	8	156.98
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	7	156.94
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	12	156.88
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	14	156.78
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	5	156.45
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	6	156.17
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	15	156.0
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	15	155.99
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	7	155.95
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	5	155.9
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	8	155.53
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	7	154.95
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	9	154.87
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	4	154.63
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	8	154.55
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	2	154.52
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	2	154.38
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	14	154.35
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	10	154.28
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	10	154.15
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	13	154.14
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	2	154.08
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	7	153.99
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	11	153.64
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	6	153.57
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	15	153.44
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	12	153.43
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	9	153.42
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	4	153.18
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	3	153.16
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	2	153.1
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	3	152.94
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	14	152.87
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	9	152.8
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	14	152.76
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	6	152.72
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	15	152.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	14	152.4
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1	152.37
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	6	152.22
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1	151.98
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	4	151.82
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	12	151.78
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	15	151.58
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	15	151.54
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	12	151.44
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	2	151.38
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	8	151.27
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	11	151.12
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	2	151.06
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	10	151.04
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	10	150.77
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	3	150.64
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	3	150.52
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	2	150.52
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	11	150.49
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	7	150.35
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1	150.14
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	9	150.09
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	2	150.08
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	7	150.06
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	3	150.05
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	11	149.97
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	13	149.93
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	12	149.92
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	10	149.86
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	5	149.76
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	8	149.74
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	9	149.7
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	15	149.66
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	12	149.52
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	15	149.48
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	8	149.46
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	9	149.4
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	4	149.13
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	1	148.93
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	10	148.88
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	4	148.82
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	2	148.78
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	5	148.75
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	15	148.68
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	11	148.66
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	1	148.66
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	9	148.59
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	15	148.51
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	13	148.48
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	7	148.44
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	10	148.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	9	148.27
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	14	147.79
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	14	147.75
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	6	147.74
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	8	147.72
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	5	147.62
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	13	147.58
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	3	147.48
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	5	147.47
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	8	147.45
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	11	147.44
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	13	147.37
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	5	147.21
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	9	147.12
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	11	147.11
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	13	147.02
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	2	147.01
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	10	146.97
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1	146.96
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	12	146.89
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	6	146.78
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	14	146.78
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	12	146.71
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	9	146.69
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	6	146.66
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	2	146.6
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	13	146.6
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	4	146.54
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	12	146.47
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	10	146.44
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	5	146.44
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	14	146.38
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	3	146.36
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	14	146.27
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	14	146.06
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	8	146.01
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	9	146.01
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	6	146.01
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	3	145.96
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	3	145.88
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	14	145.87
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	3	145.85
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	14	145.85
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	12	145.79
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	13	145.56
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	7	145.31
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	10	145.23
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	7	145.13
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	3	145.12
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	15	145.12
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	2	145.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	3	144.95
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	14	144.78
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	3	144.52
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1	144.51
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	3	144.51
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	9	144.49
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	15	144.48
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	6	144.37
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	8	144.36
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	14	144.3
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	3	144.29
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	6	144.29
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	5	144.24
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	15	144.22
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	6	144.19
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	4	144.17
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	14	144.01
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	5	143.97
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	13	143.84
(1,180)	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1:54:A:GLY:N	10	143.8
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	12	143.79
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	2	143.51
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	4	143.47
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	9	143.46
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	8	143.45
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	6	143.22
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	12	143.19
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	6	143.1
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	4	143.06
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	14	142.78
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	3	142.73
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	5	142.54
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	6	142.54
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	12	142.48
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	13	142.46
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1	142.45
(1,179)	1:53:B:ILE:N	1:53:B:ILE:CA	1:53:B:ILE:C	1:54:B:GLY:N	15	142.37
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	2	142.36
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	2	142.31
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	14	142.07
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	12	141.97
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	2	141.8
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	11	141.78
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	11	141.77
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	10	141.74
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	3	141.69
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	13	141.6
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1	141.45
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	3	141.37
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	3	141.23
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	3	141.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	5	141.13
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	4	140.94
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	11	140.92
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	13	140.91
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	4	140.89
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	7	140.7
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	7	140.64
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	13	140.63
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	15	140.59
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	6	140.58
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	4	140.54
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	9	140.47
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	12	140.46
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	5	140.43
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	15	140.38
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	9	140.3
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1	140.23
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	3	140.15
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	3	140.14
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	9	140.14
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	5	140.11
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	15	140.02
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	6	139.99
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	14	139.94
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	8	139.92
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	8	139.83
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	4	139.82
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	8	139.77
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	10	139.67
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	9	139.61
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	8	139.61
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	14	139.6
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	15	139.41
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	7	139.38
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	7	139.36
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1	139.29
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	2	139.27
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	13	139.27
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	7	139.16
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	14	139.13
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	12	139.12
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	8	138.91
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	13	138.79
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	5	138.78
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	12	138.73
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	15	138.63
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	15	138.41
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	5	138.28
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	4	138.12
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	5	138.09
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	14	138.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	11	137.98
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	4	137.92
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	7	137.91
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1	137.85
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	7	137.68
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	14	137.59
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	8	137.53
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	8	137.5
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	7	137.44
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	1	137.35
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	8	137.31
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	11	137.29
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	3	137.19
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	10	137.13
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	15	137.12
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	7	137.02
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	4	136.93
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	13	136.77
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	2	136.69
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	11	136.64
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	6	136.62
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	3	136.58
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	4	136.57
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	3	136.44
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	14	136.42
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	11	136.29
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	14	136.26
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1	136.14
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	4	135.97
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	14	135.91
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	13	135.91
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	2	135.83
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	14	135.8
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	9	135.77
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	14	135.77
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	15	135.6
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	13	135.57
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	4	135.38
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	3	135.26
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	9	135.14
(1,231)	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	10	134.97
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	2	134.91
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	7	134.9
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	6	134.86
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	9	134.85
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	8	134.68
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1	134.67
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	1	134.54
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	14	134.53
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	4	134.46
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	4	134.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	6	134.2
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	8	134.2
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	3	134.08
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	10	133.97
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	7	133.86
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	15	133.81
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	8	133.78
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	10	133.77
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	11	133.75
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	15	133.75
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	6	133.72
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	8	133.53
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	11	133.5
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	13	133.33
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	5	133.19
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	9	133.09
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	1	133.08
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	7	132.91
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	12	132.85
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	9	132.85
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	2	132.84
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	6	132.73
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	15	132.7
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	11	132.69
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	14	132.58
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	9	132.47
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	9	132.4
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	15	132.38
(1,4)	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	13	132.22
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	11	132.13
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	7	131.9
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	2	131.85
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	4	131.8
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	6	131.7
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	9	131.66
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	15	131.62
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	12	131.6
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	13	131.55
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	12	131.49
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1	131.49
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	3	131.42
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	8	131.42
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	12	131.33
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	14	131.21
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	10	131.17
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1	131.12
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	10	131.07
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	7	131.05
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	13	130.98
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	13	130.97
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	8	130.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	11	130.88
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	14	130.87
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	12	130.78
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	4	130.73
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	9	130.71
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	4	130.56
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	13	130.48
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	10	130.45
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	5	130.39
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	2	130.17
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	3	130.12
(1,272)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1	130.11
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	2	130.07
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	14	129.88
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	15	129.87
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	12	129.77
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	11	129.76
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	5	129.74
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	11	129.65
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	10	129.6
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	11	129.58
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	15	129.29
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	12	129.22
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	4	129.08
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	10	129.08
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	8	129.04
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	6	128.97
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	10	128.84
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	11	128.81
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	6	128.73
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	13	128.33
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	12	128.02
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	14	127.97
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	10	127.87
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	14	127.64
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	8	127.38
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	9	127.2
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	7	127.16
(1,75)	1:25:A:GLN:N	1:25:A:GLN:CA	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	8	127.09
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1	126.74
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	8	126.67
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	4	126.63
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	15	126.57
(1,19)	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	8	126.43
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	10	126.27
(1,271)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	13	126.21
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	11	126.14
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	6	126.11
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	12	126.06
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	7	125.91
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	2	125.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	5	125.61
(1,76)	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	5	125.5
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	10	125.47
(1,276)	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	14	125.4
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	14	125.38
(1,8)	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	2	125.34
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	4	125.2
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	12	125.09
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	9	124.94
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	10	124.89
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	11	124.88
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	13	124.68
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	12	124.6
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	5	124.46
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	12	124.46
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	6	124.45
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	8	124.33
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	15	124.21
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	6	124.17
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	5	124.15
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	12	124.1
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	13	124.02
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	15	123.91
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	2	123.85
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1	123.83
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	6	123.7
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	1	123.65
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	8	123.65
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1	123.61
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	2	123.58
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	4	123.31
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	6	123.19
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	11	123.02
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	8	122.97
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	8	122.94
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	3	122.9
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	9	122.77
(1,153)	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	11	122.69
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	13	122.58
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	7	122.55
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	13	122.51
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	2	122.5
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	5	122.49
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	13	122.07
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	5	122.07
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	7	122.05
(1,16)	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	13	121.91
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	10	121.66
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	9	121.61
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	3	121.56
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	8	121.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	11	121.23
(1,50)	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	9	121.22
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	8	121.02
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	15	121.0
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	10	120.9
(1,174)	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	6	120.85
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	1	120.77
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	13	120.69
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	1	120.67
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	1	120.49
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	11	120.33
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	11	120.31
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	6	120.24
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	11	120.08
(1,289)	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	11	120.01
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	3	119.93
(1,154)	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1	119.57
(1,173)	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1	119.46
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	14	119.41
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	13	119.26
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	8	119.01
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	11	118.93
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	7	118.44
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	7	118.34
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	8	118.29
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	9	118.26
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	11	118.22
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	11	117.96
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	15	117.79
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	13	117.57
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	4	117.57
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	10	117.4
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	4	117.34
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	7	117.0
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1	116.3
(1,71)	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	1:24:B:VAL:N	13	116.04
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	2	115.89
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	6	115.84
(1,217)	1:65:B:THR:C	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	7	115.63
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	5	115.48
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	6	115.44
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1	114.77
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	7	114.5
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	5	114.38
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	9	114.22
(1,303)	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	9	114.1
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	13	114.1
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	10	114.05
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	3	113.26
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	4	113.21
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	2	112.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	2	112.47
(1,235)	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1:71:B:THR:N	10	112.47
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	5	111.96
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	4	111.29
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	12	111.17
(1,217)	1:65:B:THR:C	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	4	111.01
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	4	110.59
(1,69)	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	1:23:B:LYS:CA	1:23:B:LYS:C	9	110.55
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	15	110.39
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	11	110.36
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	9	110.16
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	6	109.9
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	2	109.71
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	15	109.6
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	5	109.41
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	14	109.38
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	1	109.37
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	5	109.34
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	7	109.2
(1,11)	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	10	108.66
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	6	108.61
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	5	108.01
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	11	107.89
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	13	107.52
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	3	106.98
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	5	106.59
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	2	106.35
(1,308)	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	15	105.94
(1,20)	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	12	105.9
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	4	105.68
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1	105.59
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	10	105.08
(1,68)	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1:23:B:LYS:N	5	104.76
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	7	104.7
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	4	104.54
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	2	104.32
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	7	104.23
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	12	103.98
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	12	103.76
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	12	103.53
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	5	103.17
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	4	103.17
(1,275)	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	12	102.9
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	11	102.66
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	10	102.55
(1,296)	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1	101.81
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	2	98.93
(1,175)	1:52:B:ASP:N	1:52:B:ASP:CA	1:52:B:ASP:C	1:53:B:ILE:N	9	98.83
(1,218)	1:65:A:THR:C	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	15	98.55
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	8	98.07
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	13	98.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	9	97.65
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	10	96.97
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	4	96.44
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	14	96.12
(1,70)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	12	95.77
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	5	95.71
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	9	95.51
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	10	95.43
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	13	95.38
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	11	95.06
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	3	95.04
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	15	94.94
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	5	94.76
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	13	94.73
(1,159)	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	1:47:B:GLU:N	11	94.73
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	4	94.72
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	5	94.62
(1,217)	1:65:B:THR:C	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	6	94.51
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	9	94.26
(1,288)	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1:94:A:ALA:N	1	94.09
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	7	93.02
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	10	92.89
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	12	92.41
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	4	92.18
(1,217)	1:65:B:THR:C	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	5	92.01
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	12	90.72
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	8	90.53
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	9	90.5
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	5	90.45
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	11	90.36
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	3	89.8
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	12	89.7
(1,160)	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	1:47:A:GLU:N	3	89.52
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	12	89.19
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	4	88.92
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	13	88.92
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	15	88.8
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	2	88.75
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	10	88.73
(1,15)	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	15	88.73
(1,236)	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1:71:A:THR:N	3	88.62
(1,217)	1:65:B:THR:C	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	8	88.6
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	9	88.55
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	7	88.52
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	10	88.35
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	12	88.27
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	7	87.93
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	6	87.85
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	7	87.7
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	13	87.69
(1,217)	1:65:B:THR:C	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	9	87.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	14	87.46
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	14	86.93
(1,176)	1:52:A:ASP:N	1:52:A:ASP:CA	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	11	86.71
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	4	86.44
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	3	86.21
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	15	86.17
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	8	85.84
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	7	85.59
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	8	85.48
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	3	85.37
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	3	84.92
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	2	84.34
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	5	84.32
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	3	84.28
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	6	84.21
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	11	84.15
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	4	83.99
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	8	83.84
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	11	83.68
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	6	83.42
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	3	83.28
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	9	83.23
(1,61)	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	1	83.23
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	5	83.12
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	6	83.1
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	15	83.03
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	15	82.87
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	11	82.75
(1,218)	1:65:A:THR:C	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	4	82.74
(1,72)	1:23:A:LYS:N	1:23:A:LYS:CA	1:23:A:LYS:C	1:24:A:VAL:N	14	82.5
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	13	82.46
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	5	82.34
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	6	81.86
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	8	81.86
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	7	81.79
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	10	81.48
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	5	81.33
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	6	81.26
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	8	81.19
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	13	81.0
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	10	80.81
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	11	80.67
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	13	80.62
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	15	80.44
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	7	79.91
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	6	79.77
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	14	79.66
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	11	79.05
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	4	78.99
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	10	78.85
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	11	78.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	10	78.58
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	11	78.45
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	13	78.43
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1	78.36
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	15	78.2
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	6	78.18
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	6	78.14
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	2	78.07
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	8	78.04
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	12	77.95
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	2	77.89
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	2	77.88
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	5	77.87
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	4	77.81
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	12	77.41
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	5	77.33
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	3	77.31
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	11	77.03
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	14	76.89
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	10	76.8
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	13	76.2
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	2	76.03
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	8	75.93
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	12	75.91
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	3	75.55
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	9	75.54
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	7	75.44
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	8	75.43
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	8	75.32
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1	75.19
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	7	75.16
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	9	75.03
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	9	74.97
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	12	74.87
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	5	74.74
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	4	74.64
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	8	74.63
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	8	74.58
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	6	74.57
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	3	74.42
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	5	74.01
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	4	73.99
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1	73.97
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	11	73.9
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	7	73.89
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	14	73.54
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	4	73.46
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	3	73.34
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	13	73.24
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	13	73.2
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	13	73.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	5	72.83
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	7	72.69
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	11	72.66
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	15	72.57
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	4	72.5
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	10	72.48
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	6	72.37
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	2	72.04
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	14	71.84
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	7	71.73
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	10	71.42
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	14	71.39
(1,57)	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	15	71.22
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	8	71.09
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	8	70.97
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	12	70.85
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	11	70.7
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	1	70.68
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	3	70.63
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	8	70.54
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	6	70.52
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	4	70.49
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	3	70.28
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	10	70.28
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	6	70.23
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	14	70.22
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	10	70.1
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	10	69.79
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	12	69.71
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	3	69.59
(1,60)	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	12	69.58
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	4	69.56
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	7	69.51
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	8	69.33
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	9	69.1
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	13	68.61
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	9	68.6
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	7	68.54
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	14	68.47
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	14	68.34
(1,44)	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1	67.99
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	5	67.86
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	9	67.84
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	4	67.63
(1,294)	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	1:95:A:VAL:CA	1:95:A:VAL:C	1	67.6
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	4	67.35
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	3	67.06
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	14	66.94
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	10	66.75
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	4	66.7
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	9	66.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	6	66.48
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	7	66.37
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	10	66.37
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	7	66.28
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	9	65.88
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	13	65.74
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	12	65.69
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	9	65.61
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	14	65.57
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	9	65.47
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	6	65.38
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	9	65.14
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	9	65.13
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	4	65.05
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	15	64.6
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	15	64.47
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	4	64.45
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	11	64.33
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1	64.31
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	6	64.31
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	11	64.22
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	2	64.16
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	5	64.14
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	5	63.3
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	15	63.29
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	8	63.15
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	12	63.12
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	8	63.11
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	6	63.1
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	4	62.9
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	7	62.73
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	6	62.59
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	8	62.53
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	7	62.49
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	2	62.32
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	15	62.31
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	9	62.13
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	14	62.09
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	7	62.01
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	15	62.01
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	4	61.85
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	7	61.8
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	13	61.64
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	4	61.47
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	3	61.45
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	15	61.02
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	7	60.98
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	7	60.89
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	9	60.85
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	9	60.77
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	13	60.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	8	60.56
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	11	60.28
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	10	60.08
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	10	60.05
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	6	60.01
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	5	60.0
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	15	59.91
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	6	59.8
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	7	59.65
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	14	59.48
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	9	59.19
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	6	59.07
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	12	58.97
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	5	58.92
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	6	58.88
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	12	58.82
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	2	58.73
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	9	58.54
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	3	58.48
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	7	58.45
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	10	58.2
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	13	58.15
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	10	57.8
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	8	57.65
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	11	57.26
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	14	57.19
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	5	57.18
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	4	57.11
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	11	56.89
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	12	56.74
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	4	56.69
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	9	56.5
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	10	56.26
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	15	56.22
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	7	56.18
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	7	56.16
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	6	56.02
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	8	55.94
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	15	55.83
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	13	55.83
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1	55.81
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	5	55.72
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	15	55.58
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	11	55.5
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	10	55.38
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	4	55.37
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	3	55.2
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	6	55.18
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1	55.17
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	2	55.02
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	7	55.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	2	54.98
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	3	54.88
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	3	54.8
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	2	54.78
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	4	54.59
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	15	54.38
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	2	54.27
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	3	54.2
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	9	53.94
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	5	53.81
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	4	53.8
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	8	53.6
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	15	53.58
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	1	53.56
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	5	53.54
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	5	53.51
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	14	53.44
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	4	53.43
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	2	53.33
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	9	53.27
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1	53.21
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	4	53.08
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	11	52.96
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	2	52.9
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	15	52.87
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	2	52.74
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	11	52.55
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	9	52.54
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	3	52.51
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	8	52.42
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	8	52.4
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	12	52.36
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	8	52.26
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	3	52.2
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	13	52.19
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	11	52.17
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	11	51.95
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	3	51.9
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	15	51.81
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	13	51.77
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	14	51.63
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	12	51.44
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	3	51.33
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	13	51.29
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	13	51.19
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	15	51.13
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	11	51.05
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	10	51.04
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	4	51.02
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	15	50.97
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	8	50.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,155)	1:45:B:THR:N	1:45:B:THR:CA	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1	50.85
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	10	50.6
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	4	50.46
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1	50.35
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	3	50.31
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	15	50.19
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	12	50.19
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	5	50.17
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	4	50.15
(1,42)	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	1:16:B:MET:CA	1:16:B:MET:C	1	50.06
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	13	50.01
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	6	49.94
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1	49.82
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	9	49.68
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	6	49.66
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	6	49.66
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	14	49.6
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	3	49.54
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	4	49.5
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	12	49.42
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	3	49.4
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	12	49.37
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	3	49.31
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	4	49.22
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1	49.12
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	14	49.09
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	8	48.98
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	13	48.94
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	14	48.9
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	5	48.88
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	15	48.88
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	8	48.82
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	9	48.8
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	11	48.75
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	11	48.62
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	5	48.56
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	6	48.56
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	12	48.39
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	9	48.31
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	13	48.24
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	2	48.24
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	7	48.16
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	14	48.12
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	7	48.12
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	15	47.98
(1,62)	1:20:A:THR:C	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	5	47.89
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	13	47.86
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	3	47.82
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	11	47.73
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	8	47.65
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	15	47.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	7	47.61
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	10	47.57
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	15	47.49
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	13	47.44
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	11	47.44
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1	47.37
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	7	47.26
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	7	47.23
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	15	47.23
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	13	47.11
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	8	46.82
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	6	46.57
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	4	46.36
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	7	46.28
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	6	46.23
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	8	46.21
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	10	46.09
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	14	46.09
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	15	45.96
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	5	45.82
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	4	45.75
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	9	45.62
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	15	45.54
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	5	45.53
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	4	45.48
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	13	45.43
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	8	45.28
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	3	45.25
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	2	45.12
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	2	45.07
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	12	44.79
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	4	44.64
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	13	44.52
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	2	44.38
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	6	44.33
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	6	44.28
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	15	44.25
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	8	43.98
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	3	43.92
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	4	43.91
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	11	43.77
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	15	43.76
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1	43.61
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	9	43.58
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	15	43.55
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	8	43.5
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	14	43.49
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	7	43.38
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	10	43.31
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	14	43.21
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	5	43.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	4	43.06
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	13	42.97
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	12	42.96
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	14	42.95
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	4	42.87
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	10	42.85
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	7	42.8
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	8	42.76
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	11	42.75
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	12	42.75
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	9	42.64
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	6	42.59
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	6	42.56
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	3	42.53
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1	42.45
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	11	42.3
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	9	42.17
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	13	42.13
(1,269)	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	2	42.07
(1,187)	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	15	41.89
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	15	41.48
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	15	41.41
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	7	41.41
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	2	41.41
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1	41.39
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	13	41.04
(1,280)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	15	40.82
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	2	40.74
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	15	40.7
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	15	40.65
(1,298)	1:95:A:VAL:C	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1	40.62
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	9	40.57
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	14	40.55
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	2	40.55
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	4	40.47
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	9	40.38
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	11	40.27
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	12	40.23
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	15	40.14
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	5	40.14
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	3	40.09
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	6	40.08
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	4	40.08
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	12	40.03
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	8	40.02
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1	39.99
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	6	39.96
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	6	39.88
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	10	39.86
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	12	39.82
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	6	39.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	11	39.79
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	3	39.72
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	14	39.58
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	2	39.58
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	11	39.54
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	9	39.48
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	3	39.47
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	13	39.26
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	14	39.08
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	9	38.63
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	10	38.54
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	9	38.48
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	12	38.47
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	10	38.29
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	5	38.28
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	8	38.23
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	14	38.19
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	11	38.02
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	7	37.96
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	10	37.85
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	15	37.85
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	15	37.8
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	4	37.79
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	7	37.79
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	15	37.76
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	5	37.72
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	5	37.67
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	6	37.57
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	5	37.53
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	15	37.29
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	2	37.29
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	11	37.2
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	14	37.17
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	14	37.12
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	10	37.11
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	11	36.99
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	12	36.98
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	3	36.88
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	11	36.78
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	12	36.76
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	15	36.65
(1,305)	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1	36.64
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	9	36.59
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	2	36.56
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	2	36.55
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	15	36.53
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	12	36.5
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	6	36.45
(1,156)	1:45:A:THR:N	1:45:A:THR:CA	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	6	36.43
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	9	36.4
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	10	36.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	9	36.26
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	15	36.25
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	11	36.24
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	6	36.21
(1,61)	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	7	36.2
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	7	36.15
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	6	36.12
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	2	36.08
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	2	36.0
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	13	35.99
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	9	35.85
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	5	35.82
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	10	35.81
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	7	35.64
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	15	35.61
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	4	35.56
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	2	35.53
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	11	35.45
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	15	35.37
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	5	35.27
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	13	35.27
(1,270)	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	10	35.23
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	2	35.21
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	14	35.18
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	8	35.15
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	1	35.14
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	6	35.06
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	13	35.05
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	10	35.02
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	2	34.97
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1	34.94
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	6	34.91
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	3	34.91
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	12	34.91
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	4	34.9
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	7	34.89
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	6	34.61
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	14	34.6
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	10	34.59
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	10	34.46
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	9	34.45
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	13	34.37
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	13	34.36
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	5	34.36
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	15	34.3
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	11	34.29
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	2	34.21
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	6	34.1
(1,66)	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	1	34.06
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	10	33.87
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	11	33.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	3	33.85
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	4	33.84
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	9	33.83
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	9	33.81
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	2	33.81
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	7	33.74
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1	33.65
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	7	33.64
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	8	33.63
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	6	33.63
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	10	33.4
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	4	33.37
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	13	33.31
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	11	33.29
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	6	33.27
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	8	33.26
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	9	33.19
(1,18)	1:9:B:ALA:C	1:10:B:ALA:N	1:10:B:ALA:CA	1:10:B:ALA:C	15	33.17
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	4	33.16
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	11	33.13
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	13	33.12
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	14	33.07
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	9	32.97
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	1	32.94
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	11	32.92
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	13	32.9
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	14	32.88
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	4	32.82
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	10	32.79
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	7	32.78
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	11	32.77
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	12	32.74
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1	32.64
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	5	32.62
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	5	32.55
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	5	32.51
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	13	32.44
(1,182)	1:54:A:GLY:C	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	2	32.43
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	13	32.41
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	7	32.39
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	14	32.37
(1,280)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	10	32.35
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	5	32.32
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	3	32.3
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	6	32.21
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	2	32.2
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	5	32.13
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	10	32.08
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	5	32.01
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	11	32.01
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1	32.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	7	31.99
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	5	31.95
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	7	31.92
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	15	31.9
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	14	31.85
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	8	31.79
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	8	31.74
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	12	31.74
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	14	31.72
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	13	31.72
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	7	31.69
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	7	31.65
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	11	31.61
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	12	31.5
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	12	31.46
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	5	31.45
(1,241)	1:79:A:ALA:C	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	7	31.32
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	10	31.26
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	8	31.26
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	7	31.2
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	5	31.18
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	15	31.16
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	5	31.1
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	14	31.09
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	10	31.09
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	7	31.08
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	3	31.03
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	8	31.02
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	11	30.99
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	3	30.96
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1	30.96
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	8	30.96
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	3	30.85
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	2	30.76
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	12	30.62
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	11	30.59
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	7	30.57
(1,187)	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	14	30.57
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	9	30.56
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	10	30.53
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	3	30.46
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	9	30.44
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	9	30.42
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	6	30.4
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	14	30.37
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	10	30.37
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	11	30.36
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	7	30.35
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	4	30.28
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	15	30.27
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	2	30.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1	30.24
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	11	30.2
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	2	30.18
(1,43)	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	10	29.99
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	8	29.91
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	11	29.84
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	10	29.79
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	4	29.79
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	8	29.76
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	12	29.76
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	9	29.71
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	11	29.57
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	13	29.51
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	7	29.48
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	4	29.48
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	15	29.34
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	7	29.31
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	11	29.28
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	6	29.24
(1,282)	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1	29.24
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	3	29.22
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	5	29.22
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	13	29.21
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	1	29.19
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	14	29.14
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	6	29.06
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	3	29.03
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	8	28.99
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	4	28.97
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	6	28.96
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	2	28.93
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	3	28.89
(1,232)	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1	28.88
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	4	28.86
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1	28.84
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	5	28.83
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	7	28.8
(1,187)	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	13	28.78
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	10	28.73
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	11	28.72
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	14	28.68
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	6	28.68
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	9	28.64
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	4	28.6
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	13	28.56
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	13	28.54
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	9	28.53
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	4	28.48
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	9	28.47
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	13	28.44
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	6	28.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	5	28.41
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1	28.41
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	6	28.4
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	7	28.38
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	10	28.31
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	9	28.29
(1,63)	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	1	28.29
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	13	28.27
(1,101)	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1	28.24
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	2	28.18
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	1	28.15
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	8	28.04
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	12	27.91
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	3	27.9
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	8	27.89
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	12	27.88
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	10	27.78
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	2	27.75
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	12	27.64
(1,35)	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	4	27.64
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	5	27.54
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	8	27.53
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	2	27.5
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	11	27.47
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	14	27.46
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	5	27.39
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	7	27.38
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	6	27.38
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	15	27.36
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	2	27.35
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	3	27.34
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	4	27.33
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	13	27.3
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	12	27.29
(1,3)	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	4	27.29
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	4	27.28
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	1	27.27
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	2	27.24
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	11	27.21
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	13	27.21
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	8	27.17
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	4	27.11
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	15	27.01
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	6	27.01
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	4	27.0
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1	26.99
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	5	26.95
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	2	26.92
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	4	26.82
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	10	26.79
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	6	26.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	14	26.73
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	7	26.73
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	8	26.66
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	8	26.66
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	8	26.64
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	8	26.63
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	13	26.61
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	6	26.58
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	12	26.53
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	11	26.53
(1,284)	1:92:A:THR:N	1:92:A:THR:CA	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	4	26.52
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	14	26.5
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	4	26.47
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	5	26.45
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	14	26.44
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	12	26.41
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	10	26.41
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	12	26.37
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	4	26.36
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	11	26.32
(1,281)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	10	26.29
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	15	26.28
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	14	26.24
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	2	26.16
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	14	26.14
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	3	26.13
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	14	26.1
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	7	26.04
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	6	26.03
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	15	26.0
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	3	25.99
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	3	25.93
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	2	25.92
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	4	25.92
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1	25.91
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	4	25.88
(1,307)	1:98:A:HIS:N	1:98:A:HIS:CA	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1	25.86
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	9	25.85
(1,242)	1:79:B:ALA:C	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1	25.82
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	11	25.82
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	7	25.78
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	4	25.77
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	12	25.75
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	10	25.68
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	2	25.67
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	7	25.65
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	14	25.56
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	13	25.55
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	3	25.55
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	6	25.55
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	6	25.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	13	25.51
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	6	25.51
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	13	25.45
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	5	25.45
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	2	25.43
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	2	25.42
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	2	25.4
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	7	25.37
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	8	25.26
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	3	25.19
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	15	25.18
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	9	25.17
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	7	25.16
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	12	25.12
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	12	25.1
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	1	25.07
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	11	25.05
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	7	24.99
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	2	24.98
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	5	24.97
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	12	24.94
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	8	24.92
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	10	24.92
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	14	24.92
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	6	24.91
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	14	24.9
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	14	24.88
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	9	24.87
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	15	24.85
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	15	24.84
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	3	24.82
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	11	24.82
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	3	24.76
(1,224)	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1	24.76
(1,283)	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	15	24.67
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	13	24.67
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	2	24.66
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	9	24.62
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	2	24.61
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	2	24.61
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	5	24.58
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	15	24.53
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	7	24.51
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	8	24.46
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	4	24.44
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	3	24.4
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	14	24.4
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	13	24.36
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	2	24.35
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	6	24.35
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	12	24.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	9	24.29
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	3	24.28
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	6	24.27
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	6	24.25
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	2	24.24
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	3	24.22
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	8	24.2
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	10	24.2
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	5	24.19
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	12	24.12
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	5	24.09
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	5	24.08
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	5	24.04
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	15	24.02
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	14	23.95
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	11	23.92
(1,52)	1:18:B:ASP:N	1:18:B:ASP:CA	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	3	23.75
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	12	23.72
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	13	23.7
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	12	23.69
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	14	23.61
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	4	23.56
(1,24)	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	8	23.56
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1	23.53
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	7	23.52
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	6	23.51
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	9	23.51
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	15	23.42
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	5	23.42
(1,157)	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	6	23.37
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	12	23.35
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	9	23.32
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	3	23.31
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	14	23.25
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	8	23.25
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	12	23.22
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	1	23.21
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	9	23.21
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	12	23.16
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	5	23.01
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	5	23.0
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	7	22.99
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	7	22.92
(1,281)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	15	22.87
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	11	22.87
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	11	22.85
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	2	22.85
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	12	22.82
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	14	22.81
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	12	22.8
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	3	22.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	4	22.74
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	6	22.72
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	6	22.72
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	14	22.71
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	11	22.69
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	3	22.65
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	10	22.65
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	14	22.62
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	1	22.61
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	12	22.61
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	10	22.6
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	12	22.6
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	12	22.59
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	8	22.59
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	4	22.59
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	8	22.57
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	3	22.56
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	8	22.56
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	7	22.55
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	8	22.53
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	12	22.51
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	7	22.46
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	5	22.4
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	12	22.37
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	14	22.37
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	2	22.27
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	15	22.22
(1,309)	1:98:B:HIS:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	15	22.2
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	6	22.19
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	9	22.15
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	14	22.15
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	8	22.09
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	15	22.06
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	10	22.04
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	11	22.01
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	14	21.97
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	9	21.93
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	6	21.93
(1,210)	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	9	21.89
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	2	21.87
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	3	21.85
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	9	21.83
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	12	21.72
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	7	21.69
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	8	21.65
(1,222)	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	7	21.64
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	6	21.62
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	11	21.59
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	12	21.56
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	6	21.55
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	7	21.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	15	21.48
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	10	21.46
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	13	21.44
(1,222)	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	3	21.4
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	14	21.36
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	4	21.36
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	7	21.34
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	4	21.33
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	15	21.32
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	7	21.31
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	6	21.3
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	14	21.3
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	5	21.3
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	12	21.29
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	4	21.27
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	3	21.26
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	3	21.25
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	12	21.24
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	3	21.24
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	6	21.23
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	8	21.22
(1,165)	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	3	21.13
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	5	21.08
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	10	21.06
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	5	21.05
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	12	21.04
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	8	21.02
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	7	21.01
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	3	20.96
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	13	20.94
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	3	20.94
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	11	20.94
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	13	20.93
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	8	20.93
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	10	20.92
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	13	20.91
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	15	20.88
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	4	20.87
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	2	20.83
(1,165)	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	15	20.83
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	15	20.82
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	2	20.74
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	14	20.74
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	9	20.73
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	14	20.7
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	10	20.68
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	12	20.67
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	11	20.63
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	9	20.55
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	11	20.52
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	11	20.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	9	20.51
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	12	20.5
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	15	20.46
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	5	20.42
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	4	20.41
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	15	20.4
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1	20.39
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	8	20.39
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	2	20.36
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	9	20.32
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	12	20.32
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	15	20.28
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	1	20.26
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	8	20.25
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	12	20.22
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	11	20.21
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	3	20.18
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	11	20.13
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	7	20.07
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	11	20.02
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	3	20.02
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	11	20.0
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	15	19.99
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1	19.98
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	7	19.97
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	5	19.94
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	4	19.93
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	14	19.93
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	8	19.91
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	8	19.91
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	3	19.88
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	15	19.83
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	9	19.8
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	11	19.77
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	10	19.73
(1,285)	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	5	19.71
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	14	19.68
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	14	19.66
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	11	19.66
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	11	19.65
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	6	19.64
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	6	19.63
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	15	19.59
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	6	19.58
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	7	19.57
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	4	19.55
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	15	19.55
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	1	19.52
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	4	19.52
(1,165)	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	13	19.49
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	3	19.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	5	19.49
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	13	19.47
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	6	19.46
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	8	19.45
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	14	19.35
(1,260)	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	5	19.34
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	14	19.34
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	13	19.33
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	7	19.29
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	9	19.22
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	4	19.2
(1,212)	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	8	19.18
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	7	19.17
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	15	19.09
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	1	19.06
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	10	19.05
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1	19.04
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	5	19.01
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	15	19.01
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	12	18.98
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	3	18.96
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	12	18.96
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	8	18.95
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	4	18.92
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	13	18.92
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	3	18.9
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	15	18.88
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	11	18.85
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	15	18.82
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	8	18.81
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	9	18.78
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	12	18.78
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	4	18.77
(1,135)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	9	18.77
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	12	18.73
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	4	18.71
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	5	18.7
(1,285)	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	15	18.69
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	14	18.67
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	5	18.65
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	12	18.65
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	15	18.63
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	7	18.57
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	9	18.56
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	14	18.56
(1,214)	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	3	18.55
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	6	18.53
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	14	18.52
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	2	18.51
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	5	18.5
(1,3)	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1	18.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	12	18.44
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	8	18.44
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	7	18.43
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	3	18.43
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	14	18.42
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	3	18.42
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	1	18.39
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	2	18.37
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	8	18.37
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	5	18.34
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	3	18.33
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	9	18.3
(1,260)	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	6	18.27
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	13	18.27
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	9	18.23
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	7	18.22
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	9	18.22
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	15	18.21
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	12	18.21
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1	18.2
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	11	18.18
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	13	18.18
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	3	18.18
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	13	18.16
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	4	18.16
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	15	18.15
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	14	18.14
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	14	18.13
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	14	18.13
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	12	18.12
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	15	18.11
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	12	18.08
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	8	18.08
(1,165)	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	14	18.08
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	6	18.08
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	12	18.05
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	12	18.01
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	15	18.0
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	10	17.96
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	9	17.95
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	13	17.95
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	12	17.94
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	3	17.92
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	15	17.92
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	6	17.92
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	15	17.91
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	12	17.91
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	8	17.91
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	12	17.89
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	6	17.85
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	10	17.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	6	17.84
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	15	17.81
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	15	17.8
(1,157)	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	8	17.8
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	8	17.78
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	12	17.77
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1	17.74
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	13	17.73
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	7	17.72
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	8	17.72
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	5	17.71
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	7	17.68
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	10	17.67
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	9	17.67
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	13	17.63
(1,268)	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	2	17.57
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	10	17.57
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	13	17.57
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	8	17.54
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1	17.54
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	7	17.5
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	13	17.49
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	7	17.47
(1,122)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	14	17.46
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	15	17.46
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	4	17.45
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	5	17.45
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	11	17.43
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	9	17.41
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	6	17.39
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	9	17.36
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	7	17.34
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	1	17.33
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	6	17.32
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	6	17.32
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	6	17.3
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	2	17.29
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	7	17.28
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	11	17.28
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	15	17.27
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	3	17.27
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	14	17.25
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	2	17.25
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	14	17.2
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	12	17.17
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	12	17.15
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	10	17.12
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	15	17.12
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	6	17.08
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	9	17.07
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	4	17.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1	17.06
(1,207)	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	5	17.05
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	9	17.03
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	5	17.03
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1	17.02
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	7	17.01
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	9	16.98
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	8	16.92
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	8	16.91
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	5	16.89
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	15	16.88
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	4	16.88
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	8	16.87
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	14	16.86
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	4	16.82
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	5	16.82
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	10	16.81
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	7	16.79
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	4	16.76
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	14	16.75
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	10	16.73
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	2	16.72
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	15	16.71
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	5	16.68
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	4	16.67
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	9	16.66
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	13	16.66
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	15	16.63
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	5	16.63
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	9	16.62
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	11	16.62
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	11	16.59
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	11	16.59
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	7	16.59
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	14	16.58
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	2	16.57
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	4	16.56
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1	16.53
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	5	16.5
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	5	16.49
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	6	16.47
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	9	16.44
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	8	16.43
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	4	16.42
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	12	16.39
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	7	16.36
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	4	16.32
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	11	16.3
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	9	16.28
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	5	16.27
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	6	16.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,164)	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	13	16.23
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	13	16.22
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	13	16.2
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1	16.2
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	12	16.14
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	2	16.12
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	15	16.11
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	14	16.1
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	11	16.1
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	8	16.09
(1,209)	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	5	16.07
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	3	16.07
(1,165)	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1	16.07
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	14	16.05
(1,213)	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	2	16.03
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	2	16.02
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	14	16.02
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	13	16.01
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	10	16.01
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	8	16.01
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	3	16.0
(1,6)	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	10	16.0
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	12	15.99
(1,277)	1:90:A:ILE:C	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1	15.98
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	14	15.98
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	7	15.95
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	12	15.93
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	6	15.92
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	14	15.9
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	7	15.9
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	13	15.88
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1	15.86
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	4	15.85
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	12	15.82
(1,222)	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	6	15.77
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	11	15.77
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	5	15.71
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	13	15.7
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	5	15.67
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	5	15.65
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	3	15.64
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	10	15.62
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	2	15.61
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	8	15.59
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	5	15.55
(1,230)	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	1:69:B:PRO:CA	1:69:B:PRO:C	7	15.54
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	11	15.49
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1	15.49
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	13	15.48
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	8	15.48
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	14	15.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	12	15.47
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	11	15.45
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	4	15.43
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	10	15.42
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	4	15.42
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	12	15.4
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	9	15.39
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	8	15.37
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	12	15.36
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	15	15.34
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	2	15.31
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	4	15.31
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	8	15.29
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	13	15.29
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	8	15.28
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	7	15.28
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	11	15.25
(1,80)	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	7	15.25
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	6	15.23
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	12	15.22
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	11	15.2
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	9	15.2
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	7	15.19
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	3	15.18
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	3	15.17
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	2	15.08
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	3	15.08
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	6	15.08
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	14	15.07
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	2	15.04
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	2	15.03
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	13	15.0
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	15	15.0
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	9	15.0
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	15	14.97
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	2	14.96
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	15	14.95
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	3	14.93
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	6	14.91
(1,122)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	12	14.89
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	15	14.87
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	6	14.84
(1,187)	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	12	14.83
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	6	14.82
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	9	14.81
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	8	14.8
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	10	14.8
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	11	14.8
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	5	14.78
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1	14.74
(1,207)	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	4	14.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	10	14.71
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	4	14.69
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	13	14.69
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	14	14.69
(1,97)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	14	14.65
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	13	14.63
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	11	14.62
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	4	14.6
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	10	14.58
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	3	14.57
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	6	14.55
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	10	14.54
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	2	14.52
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	8	14.52
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	11	14.51
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	4	14.49
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	5	14.46
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	1	14.45
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	11	14.42
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	7	14.41
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	15	14.41
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	15	14.39
(1,158)	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	12	14.38
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	12	14.38
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	2	14.38
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	5	14.37
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	2	14.37
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	10	14.36
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	7	14.36
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	1	14.36
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	8	14.33
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	6	14.31
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	8	14.28
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	14	14.28
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	14	14.27
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	12	14.26
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	11	14.23
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	11	14.13
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	8	14.12
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	11	14.09
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	15	14.08
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	6	14.07
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	3	14.05
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	4	14.02
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	8	14.02
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	9	14.01
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	10	14.01
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	3	14.0
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	12	13.99
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	10	13.98
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	3	13.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	4	13.96
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	15	13.93
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	6	13.91
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	15	13.91
(1,80)	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	3	13.9
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	14	13.89
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	2	13.88
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1	13.85
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1	13.81
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	8	13.78
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	5	13.76
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	7	13.75
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	5	13.74
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	10	13.74
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1	13.73
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	6	13.73
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	6	13.73
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	9	13.71
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	15	13.69
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	8	13.68
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	14	13.67
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	10	13.66
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	9	13.65
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	9	13.62
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	9	13.6
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	14	13.6
(1,74)	1:24:B:VAL:C	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	10	13.6
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	5	13.59
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	14	13.59
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	7	13.59
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	11	13.57
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	9	13.57
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	13	13.57
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	11	13.56
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1	13.55
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	5	13.55
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1	13.53
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	15	13.53
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	4	13.52
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	14	13.51
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	7	13.51
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1	13.5
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	13	13.5
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	14	13.48
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	10	13.48
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	10	13.48
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	2	13.47
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	2	13.46
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	3	13.45
(1,285)	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	13	13.43
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	7	13.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	5	13.39
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	3	13.38
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	3	13.37
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	10	13.37
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	15	13.35
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	10	13.34
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	2	13.33
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	5	13.33
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	3	13.32
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	9	13.32
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	4	13.31
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	13	13.28
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	12	13.24
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	12	13.24
(1,74)	1:24:B:VAL:C	1:25:B:GLN:N	1:25:B:GLN:CA	1:25:B:GLN:C	15	13.22
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	11	13.21
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	3	13.21
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	14	13.19
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	10	13.18
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	8	13.14
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	15	13.12
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	7	13.11
(1,24)	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	10	13.1
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	9	13.09
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	2	13.09
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	9	13.08
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	14	13.08
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	10	13.04
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	8	13.0
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1	12.99
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	11	12.97
(1,64)	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	2	12.97
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	10	12.96
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	8	12.96
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	4	12.95
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	14	12.94
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	6	12.93
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	9	12.88
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	3	12.88
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	3	12.87
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	11	12.87
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	15	12.84
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	5	12.84
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	3	12.84
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	4	12.81
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	14	12.8
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	9	12.8
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	7	12.78
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	10	12.78
(1,205)	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	8	12.77
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	4	12.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	15	12.74
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	14	12.73
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	11	12.73
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	6	12.72
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	3	12.7
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	11	12.69
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	9	12.69
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	14	12.68
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	2	12.66
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	12	12.66
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	4	12.66
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	13	12.65
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	8	12.64
(1,195)	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	14	12.6
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	11	12.6
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	4	12.57
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	10	12.55
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	5	12.55
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	11	12.49
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	7	12.49
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	3	12.45
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	8	12.44
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	15	12.43
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1	12.42
(1,6)	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	1	12.41
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	7	12.4
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	13	12.4
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	14	12.39
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	7	12.39
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	11	12.34
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	3	12.32
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	7	12.32
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	2	12.31
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	9	12.27
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	8	12.27
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1	12.25
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	3	12.24
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	7	12.22
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	9	12.21
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	8	12.19
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	3	12.15
(1,97)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	5	12.14
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	3	12.09
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	13	12.08
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	3	12.08
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	3	12.05
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	14	12.05
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	11	12.03
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	6	11.99
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	7	11.98
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	13	11.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	10	11.97
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	13	11.96
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	9	11.94
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	14	11.93
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	4	11.93
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	10	11.92
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	4	11.91
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	13	11.9
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	14	11.89
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	8	11.89
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	2	11.87
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	11	11.87
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	2	11.85
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1	11.84
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	12	11.81
(1,39)	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	13	11.81
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	1	11.78
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	14	11.74
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	11	11.72
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	11	11.71
(1,98)	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	6	11.65
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	12	11.64
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	12	11.64
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	8	11.63
(1,66)	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	1:22:B:ILE:CA	1:22:B:ILE:C	14	11.62
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	3	11.58
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	6	11.58
(1,212)	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	14	11.57
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	4	11.57
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	12	11.55
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	14	11.54
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	2	11.53
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	3	11.53
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	6	11.53
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	6	11.5
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	1	11.46
(1,228)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1	11.45
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	12	11.45
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	9	11.45
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	6	11.44
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	3	11.44
(1,300)	1:96:A:ASP:N	1:96:A:ASP:CA	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	2	11.42
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	6	11.41
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	11	11.41
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	13	11.4
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	7	11.39
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	4	11.38
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	6	11.38
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	8	11.38
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	8	11.37
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	14	11.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	6	11.37
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	8	11.36
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	15	11.33
(1,219)	1:66:B:GLY:N	1:66:B:GLY:CA	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1	11.32
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	10	11.29
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	2	11.29
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	2	11.28
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	3	11.24
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	6	11.24
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	2	11.24
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	4	11.24
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	6	11.24
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	4	11.22
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	6	11.21
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	9	11.19
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	4	11.17
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	14	11.16
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	7	11.15
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	7	11.15
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	8	11.14
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	9	11.14
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1	11.13
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	8	11.13
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1	11.12
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	2	11.09
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	9	11.09
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	8	11.04
(1,137)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	1:41:A:GLU:CA	1:41:A:GLU:C	3	11.03
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	3	11.01
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	6	10.99
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1	10.99
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	7	10.98
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	11	10.97
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	15	10.94
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	2	10.94
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	9	10.92
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	3	10.92
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	3	10.9
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	9	10.88
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	4	10.88
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	11	10.87
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	12	10.86
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	9	10.84
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	15	10.83
(1,190)	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	15	10.82
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	5	10.81
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	9	10.79
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	6	10.79
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	9	10.78
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1	10.77
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	12	10.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	5	10.74
(1,214)	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	7	10.73
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	11	10.7
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	6	10.69
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	7	10.65
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	4	10.65
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	14	10.63
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	4	10.61
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	9	10.6
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	12	10.58
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	10	10.57
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	7	10.57
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	14	10.57
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	12	10.56
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	3	10.56
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	4	10.55
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1	10.55
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	12	10.53
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	2	10.52
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	6	10.52
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	15	10.51
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	9	10.5
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	14	10.49
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	13	10.49
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	10	10.49
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	12	10.47
(1,172)	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	10	10.46
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	13	10.46
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1	10.45
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	2	10.45
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	3	10.42
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	15	10.41
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	15	10.39
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	3	10.38
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	12	10.33
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	8	10.33
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	10	10.33
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	11	10.29
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	13	10.27
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	8	10.27
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	10	10.26
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	3	10.25
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	7	10.22
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	14	10.22
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	8	10.2
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1	10.18
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	7	10.18
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	5	10.17
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	12	10.15
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	8	10.14
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	14	10.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,2)	1:5:B:LYS:C	1:6:B:SER:N	1:6:B:SER:CA	1:6:B:SER:C	9	10.12
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	15	10.11
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	14	10.11
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	13	10.11
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	5	10.1
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	1	10.07
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	14	10.06
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1	10.06
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	6	10.04
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	8	10.04
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	5	10.04
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	1	9.99
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	10	9.97
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	11	9.97
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	11	9.97
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	8	9.96
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	2	9.94
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	5	9.93
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	12	9.93
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	5	9.92
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	10	9.9
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1	9.88
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	13	9.88
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1	9.88
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	6	9.87
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	2	9.85
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	4	9.84
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	15	9.83
(1,213)	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	5	9.82
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	4	9.81
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	4	9.81
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	6	9.8
(1,225)	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1	9.79
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	14	9.79
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	10	9.77
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	9	9.77
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	4	9.76
(1,39)	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	10	9.76
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	9	9.75
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	6	9.75
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	4	9.74
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	11	9.73
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	4	9.7
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	12	9.67
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	14	9.67
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	6	9.65
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	10	9.63
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	9	9.63
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	5	9.6
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	9	9.59
(1,229)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	1:69:A:PRO:CA	1:69:A:PRO:C	10	9.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	13	9.58
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	5	9.53
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	11	9.53
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	14	9.53
(1,35)	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	5	9.52
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	4	9.49
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	5	9.49
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1	9.49
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	3	9.49
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	8	9.48
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	2	9.47
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	4	9.47
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	15	9.47
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	12	9.46
(1,212)	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	5	9.45
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	7	9.45
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	4	9.44
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	2	9.43
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	13	9.43
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	4	9.42
(1,249)	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	6	9.39
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1	9.38
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	10	9.38
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	14	9.37
(1,213)	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	14	9.31
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	8	9.3
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	6	9.3
(1,291)	1:94:A:ALA:N	1:94:A:ALA:CA	1:94:A:ALA:C	1:95:A:VAL:N	15	9.29
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	14	9.29
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	3	9.29
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	6	9.28
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	4	9.27
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	12	9.26
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	7	9.26
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1	9.25
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	13	9.23
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	15	9.21
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	3	9.2
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	4	9.2
(1,181)	1:54:B:GLY:C	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	7	9.19
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	2	9.19
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	3	9.18
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	8	9.18
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	4	9.18
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	2	9.15
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	4	9.15
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	5	9.14
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	3	9.13
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	7	9.13
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	12	9.12
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	7	9.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	8	9.12
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	15	9.11
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1	9.07
(1,226)	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1	9.06
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	8	9.02
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	6	9.02
(1,41)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	1:16:A:MET:CA	1:16:A:MET:C	2	9.02
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	5	8.98
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	14	8.92
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	8	8.92
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	8	8.9
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	13	8.89
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	10	8.89
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	13	8.88
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	13	8.88
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	2	8.87
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	7	8.86
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	4	8.86
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	6	8.85
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	2	8.85
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	9	8.83
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	9	8.82
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	13	8.82
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	12	8.79
(1,97)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	15	8.79
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	2	8.75
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	4	8.74
(1,35)	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1	8.74
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1	8.73
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	7	8.71
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	13	8.7
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	7	8.68
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	11	8.67
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	6	8.65
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	13	8.65
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	11	8.64
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	8	8.64
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	12	8.61
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	10	8.61
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	9	8.61
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	3	8.59
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	8	8.57
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	11	8.57
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	9	8.57
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	12	8.56
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	4	8.56
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	8	8.56
(1,249)	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	14	8.55
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	4	8.55
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	11	8.52
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	13	8.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	10	8.5
(1,207)	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	10	8.5
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	3	8.5
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	13	8.49
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1	8.47
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	10	8.47
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	10	8.46
(1,89)	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	8	8.44
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	4	8.4
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	3	8.4
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	10	8.39
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	10	8.38
(1,80)	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	4	8.37
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	12	8.36
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	9	8.31
(1,260)	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	4	8.3
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	5	8.29
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	8	8.29
(1,97)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	8	8.26
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	4	8.24
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	13	8.23
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1	8.23
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	2	8.23
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	5	8.22
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	15	8.21
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	9	8.21
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	15	8.19
(1,45)	1:16:B:MET:C	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1	8.19
(1,158)	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	11	8.18
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	14	8.18
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	2	8.16
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	2	8.15
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	10	8.14
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	2	8.14
(1,280)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	13	8.12
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	8	8.11
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	7	8.11
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	3	8.1
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	7	8.1
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	3	8.1
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	8	8.09
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	3	8.09
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	15	8.09
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	4	8.08
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	7	8.08
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	12	8.06
(1,246)	1:82:B:LYS:C	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	2	8.04
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	6	8.04
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	8	8.02
(1,59)	1:20:B:THR:N	1:20:B:THR:CA	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	3	8.02
(1,273)	1:89:A:LYS:C	1:90:A:ILE:N	1:90:A:ILE:CA	1:90:A:ILE:C	5	8.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	3	7.98
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	9	7.96
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	7	7.95
(1,63)	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	14	7.95
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	8	7.94
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	7	7.93
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	15	7.93
(1,169)	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	2	7.92
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	6	7.92
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	11	7.91
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	10	7.87
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	8	7.87
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	14	7.87
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	9	7.84
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	3	7.83
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	7	7.82
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	7	7.77
(1,283)	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	11	7.75
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	6	7.75
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	14	7.71
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	9	7.66
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	3	7.65
(1,260)	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	10	7.62
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	10	7.62
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	1	7.6
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1	7.59
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	13	7.58
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	5	7.58
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	11	7.54
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	4	7.53
(1,280)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	1	7.52
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	6	7.52
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	12	7.52
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	11	7.52
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	4	7.51
(1,251)	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	15	7.51
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	5	7.5
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	13	7.49
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	1	7.48
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	5	7.48
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	5	7.45
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	11	7.44
(1,220)	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1	7.42
(1,207)	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	7	7.4
(1,165)	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	4	7.39
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	2	7.39
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	4	7.37
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	8	7.36
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	6	7.34
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	3	7.34
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	8	7.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,120)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	14	7.33
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	1	7.32
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1	7.31
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	14	7.31
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	8	7.29
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	5	7.28
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	2	7.28
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	9	7.28
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	15	7.25
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	5	7.25
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	12	7.24
(1,64)	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	13	7.24
(1,214)	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	2	7.23
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	3	7.22
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	5	7.22
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1	7.21
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	7	7.21
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	5	7.21
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	6	7.21
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	3	7.2
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	11	7.2
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	2	7.19
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	2	7.19
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	2	7.19
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	4	7.17
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	13	7.16
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	3	7.13
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	2	7.12
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	13	7.11
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1	7.1
(1,39)	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	9	7.09
(1,98)	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1	7.08
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	6	7.06
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	11	7.04
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	2	7.04
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	10	7.03
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	14	7.03
(1,196)	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	14	7.0
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	3	6.99
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	10	6.98
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	2	6.98
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	5	6.97
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	10	6.96
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	13	6.96
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	11	6.96
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	8	6.95
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	13	6.95
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	9	6.93
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	13	6.93
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	3	6.93
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	4	6.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	14	6.91
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	12	6.91
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	4	6.9
(1,208)	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	1:63:A:PRO:N	9	6.89
(1,213)	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	3	6.88
(1,21)	1:10:B:ALA:C	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	10	6.88
(1,24)	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	9	6.87
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	5	6.85
(1,283)	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	10	6.84
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	14	6.84
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	5	6.83
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	1	6.82
(1,193)	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	1	6.79
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1	6.79
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	13	6.76
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	9	6.76
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	5	6.75
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	12	6.75
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	12	6.75
(1,6)	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	11	6.74
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	9	6.73
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	1	6.73
(1,12)	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	2	6.71
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	7	6.7
(1,3)	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	12	6.7
(1,255)	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	3	6.69
(1,251)	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	4	6.69
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	7	6.66
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	14	6.65
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	5	6.64
(1,222)	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	14	6.62
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	5	6.61
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	13	6.59
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	13	6.59
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	14	6.58
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	4	6.56
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	13	6.53
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	13	6.53
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	13	6.51
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	10	6.51
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	5	6.51
(1,247)	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	12	6.5
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	6	6.5
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	10	6.49
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	13	6.48
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	14	6.47
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	13	6.45
(1,274)	1:89:B:LYS:C	1:90:B:ILE:N	1:90:B:ILE:CA	1:90:B:ILE:C	6	6.44
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	10	6.44
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1	6.44
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	14	6.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,268)	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	11	6.41
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	11	6.41
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	2	6.41
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	10	6.4
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	6	6.4
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	7	6.39
(1,212)	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	6	6.39
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	5	6.38
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1	6.37
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	12	6.37
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	5	6.36
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	2	6.36
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	2	6.36
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	8	6.35
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	6	6.34
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	14	6.31
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	9	6.29
(1,103)	1:32:B:THR:N	1:32:B:THR:CA	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1	6.28
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	5	6.27
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	14	6.25
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	6	6.24
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	12	6.22
(1,228)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	6	6.21
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	6	6.21
(1,286)	1:92:A:THR:C	1:93:A:ASP:N	1:93:A:ASP:CA	1:93:A:ASP:C	1	6.2
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1	6.2
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	6	6.2
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	13	6.19
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	3	6.19
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1	6.17
(1,6)	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	12	6.17
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	13	6.16
(1,122)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	15	6.15
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	3	6.13
(1,259)	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	13	6.12
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	11	6.1
(1,304)	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	1:98:A:HIS:N	14	6.09
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1	6.07
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	11	6.06
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	3	6.05
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	12	6.04
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	15	6.01
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	11	6.0
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1	5.99
(1,137)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	1:41:A:GLU:CA	1:41:A:GLU:C	12	5.95
(1,80)	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	5	5.94
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	2	5.92
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	3	5.91
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	14	5.91
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	2	5.9
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	9	5.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	4	5.89
(1,260)	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	3	5.88
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	7	5.87
(1,135)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	6	5.87
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1	5.87
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	9	5.87
(1,292)	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	7	5.86
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	14	5.86
(1,122)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	10	5.85
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	10	5.85
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	10	5.83
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	7	5.83
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	8	5.82
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	10	5.81
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	6	5.8
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	2	5.8
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	10	5.79
(1,63)	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	13	5.79
(1,285)	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	10	5.75
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	9	5.74
(1,24)	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	11	5.74
(1,158)	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	13	5.73
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	11	5.73
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	11	5.71
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	15	5.71
(1,268)	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	6	5.69
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	12	5.69
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	14	5.69
(1,35)	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	9	5.69
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	13	5.67
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	6	5.67
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	6	5.66
(1,120)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1	5.64
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	5	5.63
(1,251)	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	6	5.61
(1,122)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	8	5.6
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	9	5.59
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	1	5.57
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	4	5.56
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	7	5.54
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	2	5.53
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	14	5.52
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	6	5.51
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	14	5.48
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	10	5.47
(1,212)	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	15	5.46
(1,207)	1:62:B:LYS:N	1:62:B:LYS:CA	1:62:B:LYS:C	1:63:B:PRO:N	6	5.46
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	1	5.43
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	11	5.4
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	14	5.39
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	8	5.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	5	5.38
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	15	5.38
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	1	5.37
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	15	5.37
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	12	5.37
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	8	5.35
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	2	5.34
(1,137)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	1:41:A:GLU:CA	1:41:A:GLU:C	1	5.33
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	8	5.32
(1,263)	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	2	5.3
(1,144)	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	2	5.3
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	13	5.3
(1,135)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	11	5.28
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1	5.28
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	3	5.28
(1,193)	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	10	5.27
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	15	5.27
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	14	5.27
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	12	5.26
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	2	5.26
(1,302)	1:96:A:ASP:C	1:97:A:SER:N	1:97:A:SER:CA	1:97:A:SER:C	5	5.25
(1,158)	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	8	5.24
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	12	5.23
(1,202)	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	4	5.22
(1,119)	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	8	5.21
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	1	5.2
(1,201)	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	9	5.19
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	14	5.18
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	12	5.17
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	8	5.14
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	13	5.13
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	4	5.13
(1,10)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	1:8:A:SER:CA	1:8:A:SER:C	10	5.13
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	5	5.11
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	1	5.11
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	11	5.1
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	14	5.1
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	8	5.09
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	9	5.07
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	15	5.05
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	3	5.04
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	5	5.03
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	12	5.03
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	10	5.03
(1,310)	1:98:A:HIS:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	6	5.02
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	13	4.99
(1,168)	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	1:51:B:PHE:N	5	4.97
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	13	4.97
(1,38)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	7	4.97
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	14	4.96
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1	4.96

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:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	12	4.96
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	13	4.95
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	9	4.95
(1,244)	1:80:B:GLY:N	1:80:B:GLY:CA	1:80:B:GLY:C	1:81:B:LYS:N	4	4.94
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	15	4.94
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	3	4.92
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	3	4.92
(1,186)	1:56:B:PHE:C	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	10	4.92
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	10	4.92
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	9	4.91
(1,224)	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	9	4.91
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	10	4.91
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	5	4.9
(1,79)	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	2	4.89
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	8	4.88
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	14	4.85
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	2	4.84
(1,283)	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	8	4.83
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	9	4.83
(1,249)	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	8	4.82
(1,99)	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	1:32:B:THR:N	3	4.82
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	9	4.82
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	2	4.81
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	2	4.81
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	9	4.78
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	15	4.77
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	14	4.76
(1,47)	1:17:B:ALA:N	1:17:B:ALA:CA	1:17:B:ALA:C	1:18:B:ASP:N	10	4.75
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	10	4.74
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	15	4.74
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	6	4.73
(1,162)	1:48:B:VAL:C	1:49:B:ARG:N	1:49:B:ARG:CA	1:49:B:ARG:C	11	4.71
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	13	4.71
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	11	4.69
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	9	4.69
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	11	4.67
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	7	4.65
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	13	4.64
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	15	4.63
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	5	4.62
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1	4.62
(1,250)	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	8	4.61
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	14	4.6
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	15	4.59
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	11	4.58
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	3	4.58
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	7	4.56
(1,211)	1:63:B:PRO:N	1:63:B:PRO:CA	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	1	4.53
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	4	4.53
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	12	4.53
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	2	4.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	4	4.52
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	2	4.52
(1,218)	1:65:A:THR:C	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	13	4.5
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	3	4.5
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	8	4.49
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	14	4.46
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	12	4.45
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	13	4.45
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	3	4.44
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	13	4.44
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	15	4.44
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	2	4.43
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	15	4.41
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	15	4.4
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	4	4.4
(1,86)	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	8	4.39
(1,285)	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	3	4.38
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	5	4.37
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	7	4.37
(1,237)	1:76:B:GLN:C	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	10	4.36
(1,268)	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	1:89:A:LYS:N	8	4.35
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	7	4.35
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	6	4.34
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	7	4.34
(1,6)	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	6	4.34
(1,218)	1:65:A:THR:C	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	12	4.32
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	13	4.32
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	11	4.3
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	11	4.3
(1,193)	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	9	4.29
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	5	4.27
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	4	4.27
(1,92)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	10	4.27
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	4	4.27
(1,120)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	6	4.25
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	6	4.24
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	11	4.23
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	11	4.23
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	11	4.23
(1,261)	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	1:87:B:VAL:CA	1:87:B:VAL:C	11	4.19
(1,218)	1:65:A:THR:C	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	10	4.19
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	2	4.19
(1,150)	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	14	4.18
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	8	4.17
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	8	4.17
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	9	4.15
(1,212)	1:63:A:PRO:N	1:63:A:PRO:CA	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	10	4.14
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1	4.13
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	7	4.13
(1,147)	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	1:44:A:THR:N	13	4.12
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	10	4.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	3	4.1
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1	4.1
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	6	4.09
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	12	4.09
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	14	4.07
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	15	4.07
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	14	4.06
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	10	4.05
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	2	4.04
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	10	4.03
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	9	4.03
(1,251)	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	7	4.02
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	2	4.01
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	7	4.01
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	10	4.0
(1,222)	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	2	3.99
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	4	3.97
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	3	3.96
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	7	3.95
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1	3.95
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	1	3.93
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	4	3.92
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	6	3.9
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	10	3.89
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	13	3.89
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	14	3.89
(1,198)	1:59:A:VAL:C	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1	3.88
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	11	3.87
(1,85)	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	13	3.86
(1,63)	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	10	3.84
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1	3.81
(1,122)	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	7	3.79
(1,112)	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	2	3.79
(1,214)	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1	3.77
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	7	3.74
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	11	3.74
(1,240)	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	1:78:A:PRO:N	5	3.73
(1,54)	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	11	3.72
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	11	3.71
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	4	3.7
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	8	3.7
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	9	3.68
(1,163)	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	1:50:A:LEU:N	2	3.66
(1,88)	1:28:B:ARG:N	1:28:B:ARG:CA	1:28:B:ARG:C	1:29:B:LEU:N	8	3.66
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	11	3.65
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	3	3.65
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	1	3.65
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	13	3.64
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	2	3.63
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	11	3.63
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	15	3.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	14	3.61
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	11	3.61
(1,67)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:LYS:N	3	3.58
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1	3.57
(1,128)	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	13	3.54
(1,250)	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	7	3.53
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	9	3.51
(1,251)	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	8	3.51
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	3	3.51
(1,140)	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	2	3.51
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	4	3.48
(1,193)	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	4	3.47
(1,256)	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	11	3.44
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	5	3.44
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	9	3.42
(1,58)	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	1:20:A:THR:CA	1:20:A:THR:C	12	3.42
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1	3.41
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	11	3.4
(1,137)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	1:41:A:GLU:CA	1:41:A:GLU:C	8	3.38
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	12	3.37
(1,97)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	2	3.35
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	13	3.34
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	12	3.33
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	8	3.32
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	10	3.31
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	2	3.3
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	8	3.3
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	10	3.3
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	7	3.3
(1,247)	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	5	3.29
(1,224)	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	13	3.28
(1,221)	1:66:A:GLY:C	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	10	3.27
(1,262)	1:86:A:THR:C	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	4	3.25
(1,295)	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1	3.23
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	9	3.22
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	8	3.22
(1,49)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	15	3.2
(1,224)	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	12	3.19
(1,65)	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	12	3.19
(1,28)	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	6	3.18
(1,238)	1:76:A:GLN:C	1:77:A:ILE:N	1:77:A:ILE:CA	1:77:A:ILE:C	13	3.17
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	4	3.17
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	11	3.17
(1,1)	1:5:A:LYS:C	1:6:A:SER:N	1:6:A:SER:CA	1:6:A:SER:C	4	3.16
(1,216)	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	1:65:B:THR:N	1	3.14
(1,158)	1:45:A:THR:C	1:46:A:GLY:N	1:46:A:GLY:CA	1:46:A:GLY:C	7	3.13
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1	3.12
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	10	3.12
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	8	3.08
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	4	3.08
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	11	3.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	11	3.08
(1,126)	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	1:38:B:LEU:CA	1:38:B:LEU:C	6	3.07
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	12	3.06
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	10	3.05
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	5	3.04
(1,27)	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	7	3.04
(1,118)	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	9	3.03
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	8	3.03
(1,191)	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	5	3.02
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	2	3.01
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	9	2.99
(1,114)	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	15	2.99
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	14	2.99
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	8	2.98
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	13	2.95
(1,46)	1:16:A:MET:C	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	8	2.95
(1,123)	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	7	2.94
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	15	2.94
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	5	2.93
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	9	2.93
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	13	2.92
(1,254)	1:84:A:LYS:C	1:85:A:LEU:N	1:85:A:LEU:CA	1:85:A:LEU:C	5	2.91
(1,137)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	1:41:A:GLU:CA	1:41:A:GLU:C	9	2.91
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	9	2.91
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	7	2.89
(1,95)	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	3	2.88
(1,17)	1:9:A:ALA:C	1:10:A:ALA:N	1:10:A:ALA:CA	1:10:A:ALA:C	6	2.88
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	2	2.86
(1,249)	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	10	2.85
(1,105)	1:32:B:THR:C	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1	2.85
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	2	2.84
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	9	2.83
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	14	2.83
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	13	2.83
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	10	2.82
(1,223)	1:67:A:ILE:N	1:67:A:ILE:CA	1:67:A:ILE:C	1:68:A:ASN:N	5	2.8
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	4	2.77
(1,96)	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	1	2.77
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	6	2.76
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	13	2.76
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	11	2.75
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	8	2.75
(1,40)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:MET:N	11	2.74
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	12	2.73
(1,267)	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	1:89:B:LYS:N	1	2.73
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	10	2.73
(1,9)	1:7:B:LEU:C	1:8:B:SER:N	1:8:B:SER:CA	1:8:B:SER:C	13	2.73
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	15	2.72
(1,234)	1:69:A:PRO:C	1:70:A:LYS:N	1:70:A:LYS:CA	1:70:A:LYS:C	7	2.71
(1,184)	1:55:A:LYS:N	1:55:A:LYS:CA	1:55:A:LYS:C	1:56:A:PHE:N	15	2.71
(1,61)	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	5	2.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,301)	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	1:97:B:SER:CA	1:97:B:SER:C	7	2.7
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	7	2.69
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	10	2.68
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	11	2.67
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	4	2.67
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	10	2.67
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	1	2.66
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	8	2.66
(1,98)	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	11	2.66
(1,61)	1:20:B:THR:C	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	8	2.66
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	3	2.66
(1,136)	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1	2.65
(1,98)	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	2	2.65
(1,63)	1:21:B:ASN:N	1:21:B:ASN:CA	1:21:B:ASN:C	1:22:B:ILE:N	12	2.65
(1,247)	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	6	2.61
(1,199)	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	1:61:B:THR:N	10	2.61
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	13	2.61
(1,124)	1:37:B:VAL:N	1:37:B:VAL:CA	1:37:B:VAL:C	1:38:B:LEU:N	3	2.6
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	15	2.58
(1,299)	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	1:97:B:SER:N	7	2.57
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	2	2.56
(1,51)	1:18:A:ASP:N	1:18:A:ASP:CA	1:18:A:ASP:C	1:19:A:GLU:N	11	2.55
(1,48)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:ASP:N	6	2.55
(1,260)	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1:87:B:VAL:N	7	2.54
(1,157)	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	11	2.54
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	5	2.52
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	14	2.52
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	2	2.5
(1,113)	1:34:B:LEU:C	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	7	2.49
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	5	2.49
(1,283)	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	1:93:B:ASP:N	4	2.48
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1	2.46
(1,228)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:PRO:N	15	2.45
(1,94)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:VAL:N	1:30:A:VAL:CA	1:30:A:VAL:C	2	2.44
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	6	2.43
(1,104)	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	10	2.42
(1,171)	1:51:B:PHE:N	1:51:B:PHE:CA	1:51:B:PHE:C	1:52:B:ASP:N	10	2.4
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	8	2.39
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	11	2.39
(1,36)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	15	2.37
(1,145)	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	1:43:A:ALA:CA	1:43:A:ALA:C	2	2.36
(1,194)	1:58:A:LEU:C	1:59:A:VAL:N	1:59:A:VAL:CA	1:59:A:VAL:C	2	2.35
(1,152)	1:44:A:THR:N	1:44:A:THR:CA	1:44:A:THR:C	1:45:A:THR:N	7	2.35
(1,13)	1:8:B:SER:C	1:9:B:ALA:N	1:9:B:ALA:CA	1:9:B:ALA:C	5	2.35
(1,195)	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	10	2.34
(1,30)	1:12:A:TYR:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	10	2.33
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	15	2.31
(1,31)	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	2	2.3
(1,29)	1:12:B:TYR:C	1:13:B:LEU:N	1:13:B:LEU:CA	1:13:B:LEU:C	8	2.3
(1,222)	1:66:B:GLY:C	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	5	2.27
(1,80)	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	6	2.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,170)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	13	2.25
(1,117)	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	1:36:A:LYS:CA	1:36:A:LYS:C	2	2.25
(1,281)	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	1:92:B:THR:CA	1:92:B:THR:C	9	2.24
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	11	2.24
(1,26)	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	1:12:A:TYR:CA	1:12:A:TYR:C	6	2.24
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	13	2.22
(1,245)	1:82:A:LYS:C	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	3	2.21
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	6	2.2
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	12	2.19
(1,206)	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	1:62:A:LYS:CA	1:62:A:LYS:C	5	2.18
(1,141)	1:41:A:GLU:C	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	3	2.17
(1,132)	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	10	2.17
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	13	2.16
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1	2.16
(1,188)	1:57:B:LYS:N	1:57:B:LYS:CA	1:57:B:LYS:C	1:58:B:LEU:N	13	2.1
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	4	2.1
(1,7)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:SER:N	15	2.09
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	6	2.08
(1,157)	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	7	2.08
(1,24)	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	1:12:A:TYR:N	13	2.07
(1,252)	1:84:B:LYS:N	1:84:B:LYS:CA	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	13	2.06
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	8	2.05
(1,203)	1:61:B:THR:N	1:61:B:THR:CA	1:61:B:THR:C	1:62:B:LYS:N	10	2.03
(1,120)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	9	2.02
(1,91)	1:29:B:LEU:N	1:29:B:LEU:CA	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	4	1.99
(1,77)	1:25:A:GLN:C	1:26:A:ASP:N	1:26:A:ASP:CA	1:26:A:ASP:C	10	1.99
(1,53)	1:18:B:ASP:C	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	5	1.99
(1,204)	1:61:A:THR:N	1:61:A:THR:CA	1:61:A:THR:C	1:62:A:LYS:N	5	1.98
(1,25)	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	1:12:B:TYR:CA	1:12:B:TYR:C	13	1.97
(1,278)	1:90:B:ILE:C	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	3	1.96
(1,78)	1:25:B:GLN:C	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	4	1.94
(1,290)	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	1:94:B:ALA:CA	1:94:B:ALA:C	3	1.92
(1,243)	1:80:A:GLY:N	1:80:A:GLY:CA	1:80:A:GLY:C	1:81:A:LYS:N	4	1.92
(1,39)	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	1:16:B:MET:N	14	1.92
(1,32)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	8	1.91
(1,218)	1:65:A:THR:C	1:66:A:GLY:N	1:66:A:GLY:CA	1:66:A:GLY:C	6	1.89
(1,146)	1:42:B:LEU:C	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	4	1.87
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	12	1.87
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	11	1.87
(1,293)	1:94:B:ALA:C	1:95:B:VAL:N	1:95:B:VAL:CA	1:95:B:VAL:C	7	1.86
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	14	1.86
(1,97)	1:30:B:VAL:C	1:31:B:VAL:N	1:31:B:VAL:CA	1:31:B:VAL:C	13	1.86
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	4	1.84
(1,82)	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	9	1.84
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	14	1.83
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	15	1.83
(1,34)	1:13:A:LEU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	2	1.8
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1	1.78
(1,120)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	13	1.76
(1,200)	1:60:A:THR:N	1:60:A:THR:CA	1:60:A:THR:C	1:61:A:THR:N	14	1.74
(1,166)	1:49:B:ARG:C	1:50:B:LEU:N	1:50:B:LEU:CA	1:50:B:LEU:C	4	1.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:32:A:THR:C	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	10	1.74
(1,161)	1:48:A:VAL:C	1:49:A:ARG:N	1:49:A:ARG:CA	1:49:A:ARG:C	13	1.73
(1,135)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:GLU:N	7	1.72
(1,193)	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	1:59:B:VAL:CA	1:59:B:VAL:C	5	1.7
(1,258)	1:85:B:LEU:C	1:86:B:THR:N	1:86:B:THR:CA	1:86:B:THR:C	1	1.69
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	4	1.69
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	8	1.69
(1,102)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	1:32:A:THR:CA	1:32:A:THR:C	2	1.67
(1,142)	1:41:B:GLU:C	1:42:B:LEU:N	1:42:B:LEU:CA	1:42:B:LEU:C	11	1.66
(1,14)	1:8:A:SER:C	1:9:A:ALA:N	1:9:A:ALA:CA	1:9:A:ALA:C	7	1.66
(1,215)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:THR:N	6	1.64
(1,55)	1:19:B:GLU:N	1:19:B:GLU:CA	1:19:B:GLU:C	1:20:B:THR:N	3	1.64
(1,287)	1:93:B:ASP:N	1:93:B:ASP:CA	1:93:B:ASP:C	1:94:B:ALA:N	2	1.63
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	15	1.62
(1,107)	1:33:B:SER:N	1:33:B:SER:CA	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	10	1.62
(1,133)	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	2	1.61
(1,247)	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	10	1.6
(1,151)	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	1:45:B:THR:N	4	1.6
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	7	1.6
(1,280)	1:91:B:LEU:N	1:91:B:LEU:CA	1:91:B:LEU:C	1:92:B:THR:N	14	1.59
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	7	1.59
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	9	1.59
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	11	1.58
(1,149)	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	1:44:B:THR:CA	1:44:B:THR:C	8	1.57
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	15	1.57
(1,80)	1:26:B:ASP:N	1:26:B:ASP:CA	1:26:B:ASP:C	1:27:B:ILE:N	9	1.56
(1,264)	1:87:A:VAL:N	1:87:A:VAL:CA	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	3	1.55
(1,297)	1:95:B:VAL:C	1:96:B:ASP:N	1:96:B:ASP:CA	1:96:B:ASP:C	3	1.54
(1,266)	1:87:A:VAL:C	1:88:A:SER:N	1:88:A:SER:CA	1:88:A:SER:C	13	1.53
(1,157)	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	10	1.52
(1,167)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:PHE:N	11	1.51
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	5	1.51
(1,111)	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	1:35:A:GLN:N	2	1.51
(1,84)	1:27:B:ILE:N	1:27:B:ILE:CA	1:27:B:ILE:C	1:28:B:ARG:N	10	1.51
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	2	1.49
(1,248)	1:83:B:ILE:N	1:83:B:ILE:CA	1:83:B:ILE:C	1:84:B:LYS:N	9	1.49
(1,81)	1:26:A:ASP:C	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	14	1.49
(1,178)	1:52:A:ASP:C	1:53:A:ILE:N	1:53:A:ILE:CA	1:53:A:ILE:C	8	1.48
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	3	1.46
(1,23)	1:11:B:GLU:N	1:11:B:GLU:CA	1:11:B:GLU:C	1:12:B:TYR:N	4	1.46
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	10	1.45
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	12	1.44
(1,121)	1:36:A:LYS:C	1:37:A:VAL:N	1:37:A:VAL:CA	1:37:A:VAL:C	11	1.44
(1,192)	1:58:B:LEU:N	1:58:B:LEU:CA	1:58:B:LEU:C	1:59:B:VAL:N	7	1.43
(1,227)	1:68:B:ASN:N	1:68:B:ASN:CA	1:68:B:ASN:C	1:69:B:PRO:N	15	1.42
(1,130)	1:38:B:LEU:C	1:39:B:ALA:N	1:39:B:ALA:CA	1:39:B:ALA:C	10	1.42
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	4	1.42
(1,125)	1:37:A:VAL:C	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	13	1.42
(1,90)	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	8	1.42
(1,265)	1:87:B:VAL:C	1:88:B:SER:N	1:88:B:SER:CA	1:88:B:SER:C	7	1.38
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	5	1.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,83)	1:27:A:ILE:N	1:27:A:ILE:CA	1:27:A:ILE:C	1:28:A:ARG:N	1	1.38
(1,6)	1:6:B:SER:C	1:7:B:LEU:N	1:7:B:LEU:CA	1:7:B:LEU:C	9	1.38
(1,213)	1:63:A:PRO:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	6	1.37
(1,306)	1:97:B:SER:C	1:98:B:HIS:N	1:98:B:HIS:CA	1:98:B:HIS:C	15	1.36
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	5	1.36
(1,33)	1:13:B:LEU:C	1:14:B:LYS:N	1:14:B:LYS:CA	1:14:B:LYS:C	1	1.34
(1,183)	1:55:B:LYS:N	1:55:B:LYS:CA	1:55:B:LYS:C	1:56:B:PHE:N	13	1.33
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	13	1.33
(1,109)	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	1:34:A:LEU:CA	1:34:A:LEU:C	5	1.32
(1,93)	1:29:B:LEU:C	1:30:B:VAL:N	1:30:B:VAL:CA	1:30:B:VAL:C	12	1.3
(1,224)	1:67:B:ILE:N	1:67:B:ILE:CA	1:67:B:ILE:C	1:68:B:ASN:N	7	1.29
(1,185)	1:56:A:PHE:C	1:57:A:LYS:N	1:57:A:LYS:CA	1:57:A:LYS:C	3	1.29
(1,189)	1:57:A:LYS:C	1:58:A:LEU:N	1:58:A:LEU:CA	1:58:A:LEU:C	10	1.28
(1,115)	1:35:B:GLN:N	1:35:B:GLN:CA	1:35:B:GLN:C	1:36:B:LYS:N	7	1.25
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	5	1.25
(1,110)	1:33:B:SER:C	1:34:B:LEU:N	1:34:B:LEU:CA	1:34:B:LEU:C	15	1.24
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	10	1.24
(1,279)	1:91:A:LEU:N	1:91:A:LEU:CA	1:91:A:LEU:C	1:92:A:THR:N	1	1.23
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	12	1.22
(1,108)	1:33:A:SER:N	1:33:A:SER:CA	1:33:A:SER:C	1:34:A:LEU:N	5	1.21
(1,64)	1:21:A:ASN:N	1:21:A:ASN:CA	1:21:A:ASN:C	1:22:A:ILE:N	4	1.2
(1,116)	1:35:A:GLN:N	1:35:A:GLN:CA	1:35:A:GLN:C	1:36:A:LYS:N	2	1.19
(1,239)	1:77:B:ILE:N	1:77:B:ILE:CA	1:77:B:ILE:C	1:78:B:PRO:N	4	1.18
(1,37)	1:14:B:LYS:C	1:15:B:GLU:N	1:15:B:GLU:CA	1:15:B:GLU:C	12	1.18
(1,134)	1:39:B:ALA:C	1:40:B:LYS:N	1:40:B:LYS:CA	1:40:B:LYS:C	7	1.17
(1,87)	1:28:A:ARG:N	1:28:A:ARG:CA	1:28:A:ARG:C	1:29:A:LEU:N	14	1.17
(1,172)	1:51:A:PHE:N	1:51:A:PHE:CA	1:51:A:PHE:C	1:52:A:ASP:N	7	1.16
(1,249)	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	1:84:A:LYS:CA	1:84:A:LYS:C	9	1.14
(1,247)	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	14	1.14
(1,131)	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	1:40:A:LYS:N	5	1.14
(1,197)	1:59:B:VAL:C	1:60:B:THR:N	1:60:B:THR:CA	1:60:B:THR:C	7	1.13
(1,143)	1:42:A:LEU:N	1:42:A:LEU:CA	1:42:A:LEU:C	1:43:A:ALA:N	15	1.13
(1,100)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:THR:N	8	1.13
(1,5)	1:6:A:SER:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	6	1.12
(1,214)	1:63:B:PRO:C	1:64:B:ARG:N	1:64:B:ARG:CA	1:64:B:ARG:C	5	1.11
(1,257)	1:85:A:LEU:C	1:86:A:THR:N	1:86:A:THR:CA	1:86:A:THR:C	10	1.08
(1,56)	1:19:A:GLU:N	1:19:A:GLU:CA	1:19:A:GLU:C	1:20:A:THR:N	12	1.08
(1,253)	1:84:B:LYS:C	1:85:B:LEU:N	1:85:B:LEU:CA	1:85:B:LEU:C	12	1.07
(1,127)	1:38:A:LEU:N	1:38:A:LEU:CA	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	13	1.07
(1,247)	1:83:A:ILE:N	1:83:A:ILE:CA	1:83:A:ILE:C	1:84:A:LYS:N	2	1.06
(1,120)	1:36:B:LYS:N	1:36:B:LYS:CA	1:36:B:LYS:C	1:37:B:VAL:N	8	1.06
(1,98)	1:30:A:VAL:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	13	1.06
(1,22)	1:10:A:ALA:C	1:11:A:GLU:N	1:11:A:GLU:CA	1:11:A:GLU:C	9	1.06
(1,157)	1:45:B:THR:C	1:46:B:GLY:N	1:46:B:GLY:CA	1:46:B:GLY:C	3	1.04
(1,138)	1:40:B:LYS:C	1:41:B:GLU:N	1:41:B:GLU:CA	1:41:B:GLU:C	7	1.03
(1,233)	1:69:B:PRO:C	1:70:B:LYS:N	1:70:B:LYS:CA	1:70:B:LYS:C	6	1.02
(1,129)	1:38:A:LEU:C	1:39:A:ALA:N	1:39:A:ALA:CA	1:39:A:ALA:C	4	1.01
(1,148)	1:43:B:ALA:N	1:43:B:ALA:CA	1:43:B:ALA:C	1:44:B:THR:N	7	1.0