



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 5, 2023 – 02:22 PM EDT

PDB ID : 2M8W
BMRB ID : 5844
Title : Restrained CS-Rosetta Solution NMR Structure of Staphylococcus aureus protein SAV1430. Northeast Structural Genomics Target ZR18. Structure determination
Authors : Mao, B.; Tejero, R.T.; Aramini, J.M.; Snyder, D.A.; Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)
Deposited on : 2013-05-29

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 : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
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) : 2.33

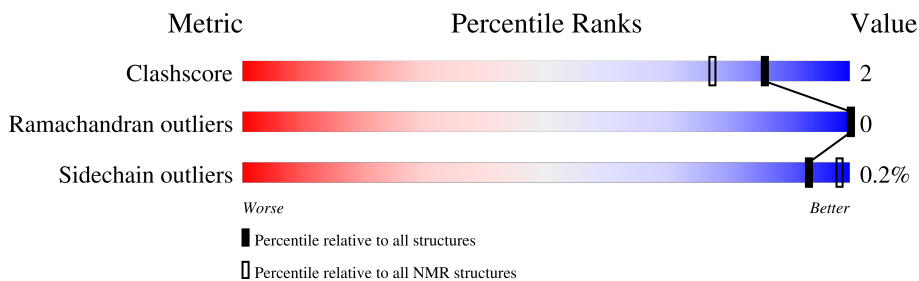
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 95%.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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	91	 81% 16%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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:2-A:20, A:27-A:83 (76)	0.58	1

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 4 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1444 atoms, of which 708 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Uncharacterized protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	91	1444	462	708	124	146	4	0

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

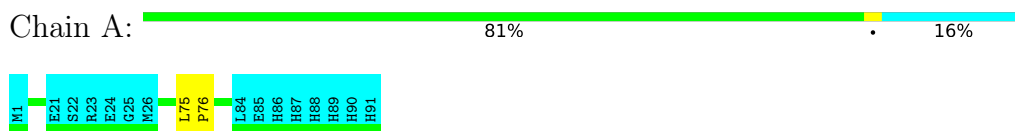
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	84	LEU	-	expression tag	UNP Q99U58
A	85	GLU	-	expression tag	UNP Q99U58
A	86	HIS	-	expression tag	UNP Q99U58
A	87	HIS	-	expression tag	UNP Q99U58
A	88	HIS	-	expression tag	UNP Q99U58
A	89	HIS	-	expression tag	UNP Q99U58
A	90	HIS	-	expression tag	UNP Q99U58
A	91	HIS	-	expression tag	UNP Q99U58

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: Uncharacterized protein

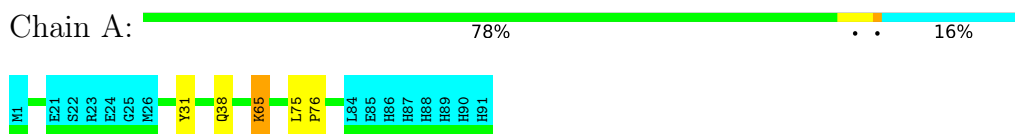


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

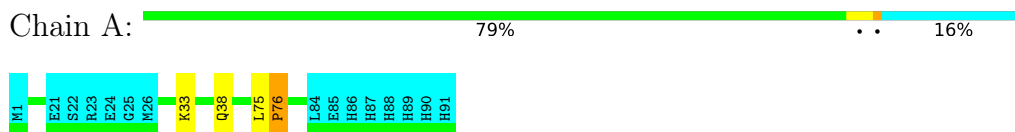
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Uncharacterized protein



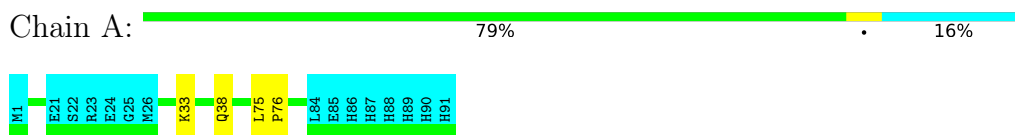
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Uncharacterized protein



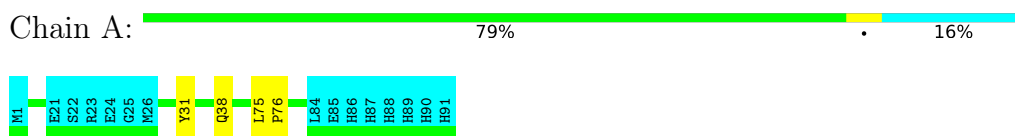
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Uncharacterized protein



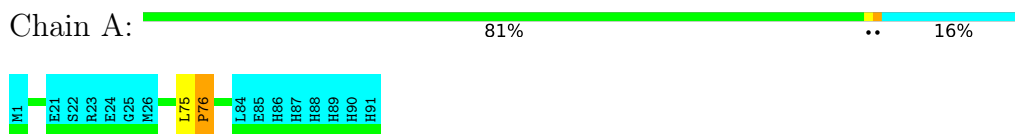
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Uncharacterized protein



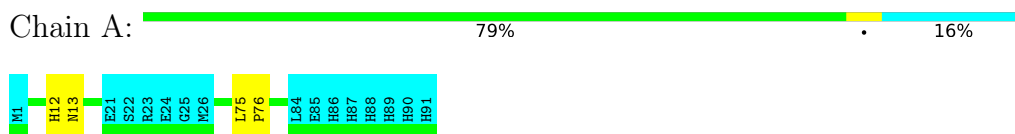
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Uncharacterized protein



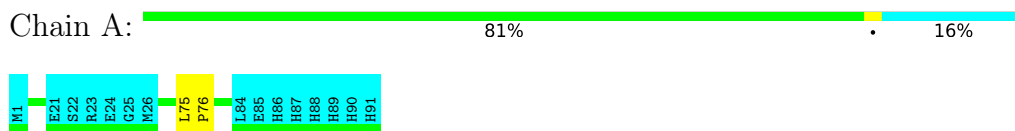
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Uncharacterized protein



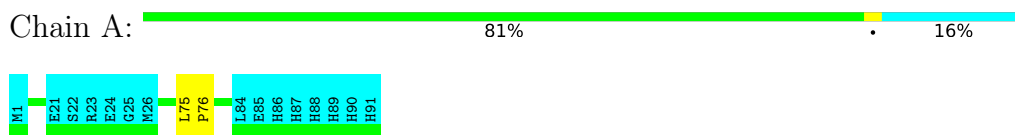
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Uncharacterized protein



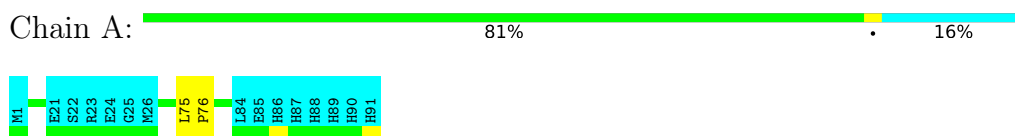
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Uncharacterized protein



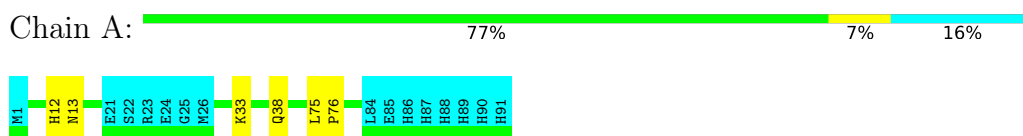
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Uncharacterized protein



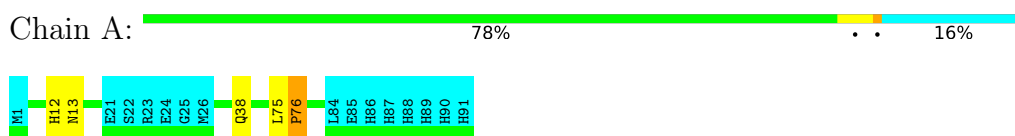
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Uncharacterized protein



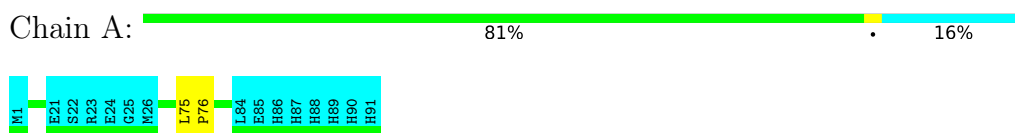
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Uncharacterized protein



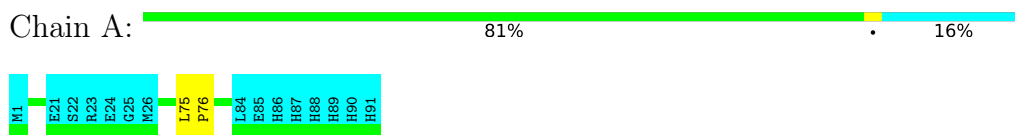
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Uncharacterized protein



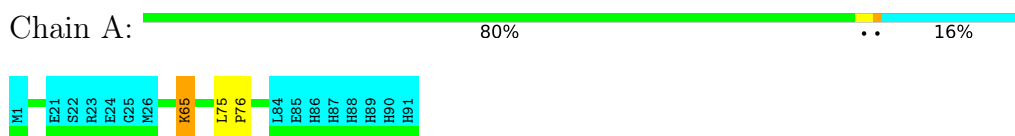
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Uncharacterized protein



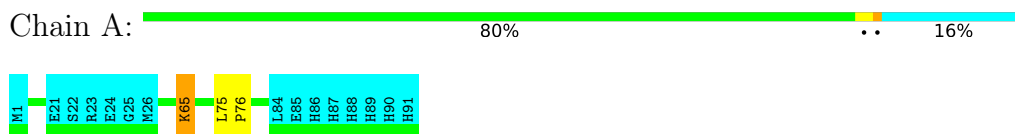
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Uncharacterized protein



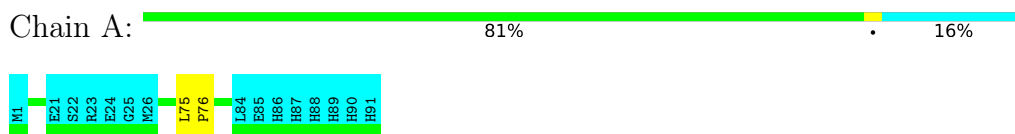
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Uncharacterized protein



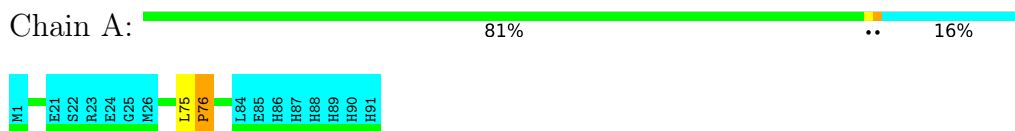
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Uncharacterized protein



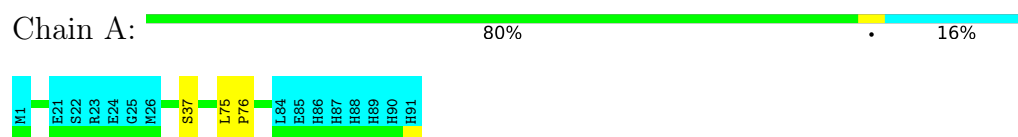
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Uncharacterized protein



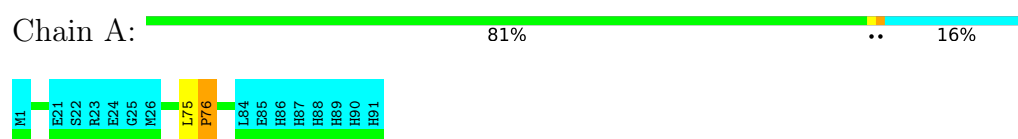
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Uncharacterized protein



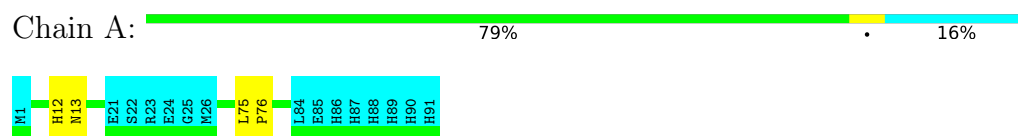
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Uncharacterized protein



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Uncharacterized protein



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: ?.

Of the 10000 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
Rosetta	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1089
Number of shifts mapped to atoms	1089
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	95%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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	0.71±0.01	0±0/615 (0.0± 0.1%)	0.37±0.00	0±0/837 (0.0± 0.0%)
All	All	0.71	5/12300 (0.0%)	0.37	0/16740 (0.0%)

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	76	PRO	N-CD	5.34	1.55	1.47	19	5

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	603	596	596	2±1
All	All	12060	11920	11920	50

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 2.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:OE1	0.65	2.30	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:HIS:O	1:A:13:ASN:HB2	0.55	2.02	6	4
1:A:75:LEU:N	1:A:76:PRO:HD2	0.53	2.18	7	3
1:A:65:LYS:HD2	1:A:65:LYS:C	0.52	2.25	1	3
1:A:75:LEU:N	1:A:76:PRO:CD	0.48	2.76	9	18
1:A:31:TYR:CD1	1:A:38:GLN:HG3	0.48	2.44	1	2
1:A:33:LYS:O	1:A:38:GLN:NE2	0.48	2.47	3	3
1:A:75:LEU:HB3	1:A:76:PRO:HD3	0.44	1.88	8	9
1:A:75:LEU:HD23	1:A:75:LEU:C	0.43	2.33	7	1
1:A:75:LEU:HB3	1:A:76:PRO:CD	0.43	2.44	7	3
1:A:12:HIS:O	1:A:13:ASN:CB	0.41	2.68	20	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	76/91 (84%)	74±1 (98±1%)	2±1 (2±1%)	0±0 (0±0%)	100	100
All	All	1520/1820 (84%)	1485 (98%)	35 (2%)	0 (0%)	100	100

There are no Ramachandran outliers.

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	72/86 (84%)	72±0 (100±0%)	0±0 (0±0%)	93	98
All	All	1440/1720 (84%)	1437 (100%)	3 (0%)	93	98

All 1 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	LYS	3

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 monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 95% for the well-defined parts and 88% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *chemical_shift_ZR18_1*

7.1.1 Bookkeeping [i](#)

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

Total number of shifts	1089
Number of shifts mapped to atoms	1089
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	5

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	87	-0.24 ± 0.38	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	85	0.20 ± 0.21	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	82	-0.03 ± 0.28	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	82	-0.10 ± 0.33	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 95%, i.e. 973 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1027. 0 out of 11 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	369/375 (98%)	149/150 (99%)	148/152 (97%)	72/73 (99%)
Sidechain	540/575 (94%)	366/374 (98%)	168/188 (89%)	6/13 (46%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	64/77 (83%)	32/38 (84%)	31/34 (91%)	1/5 (20%)
Overall	973/1027 (95%)	547/562 (97%)	347/374 (93%)	79/91 (87%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 88%, i.e. 1089 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1244. 0 out of 12 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	422/451 (94%)	171/181 (94%)	169/182 (93%)	82/88 (93%)
Sidechain	603/668 (90%)	408/434 (94%)	189/218 (87%)	6/16 (38%)
Aromatic	64/125 (51%)	32/62 (52%)	31/46 (67%)	1/17 (6%)
Overall	1089/1244 (88%)	611/677 (90%)	389/446 (87%)	89/121 (74%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

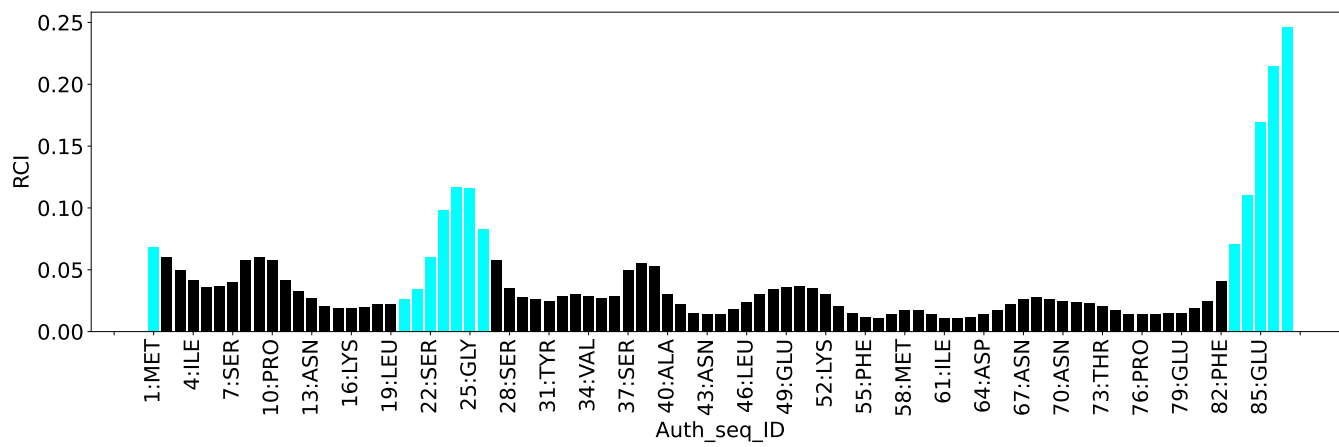
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	65	LYS	HD3	-1.02	0.54 – 2.65	-12.4
1	A	16	LYS	HE3	1.43	1.92 – 3.89	-7.5
1	A	65	LYS	HD2	0.17	0.58 – 2.64	-7.0
1	A	64	ASP	HA	6.21	3.04 – 6.12	5.3
1	A	65	LYS	HB3	0.45	0.46 – 3.04	-5.0

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	1245
Intra-residue ($ i-j =0$)	347
Sequential ($ i-j =1$)	331
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	174
Long range ($ i-j \geq 5$)	339
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	54
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	120
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	15.0
Number of long range restraints per residue ¹	4.1

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

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	5.4	0.2
0.2-0.5 (Medium)	4.0	0.5
>0.5 (Large)	3.7	1.3

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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)	0.1	8.1
10.0-20.0 (Medium)	0.9	20.0
>20.0 (Large)	119.0	174.6

9 Distance violation analysis

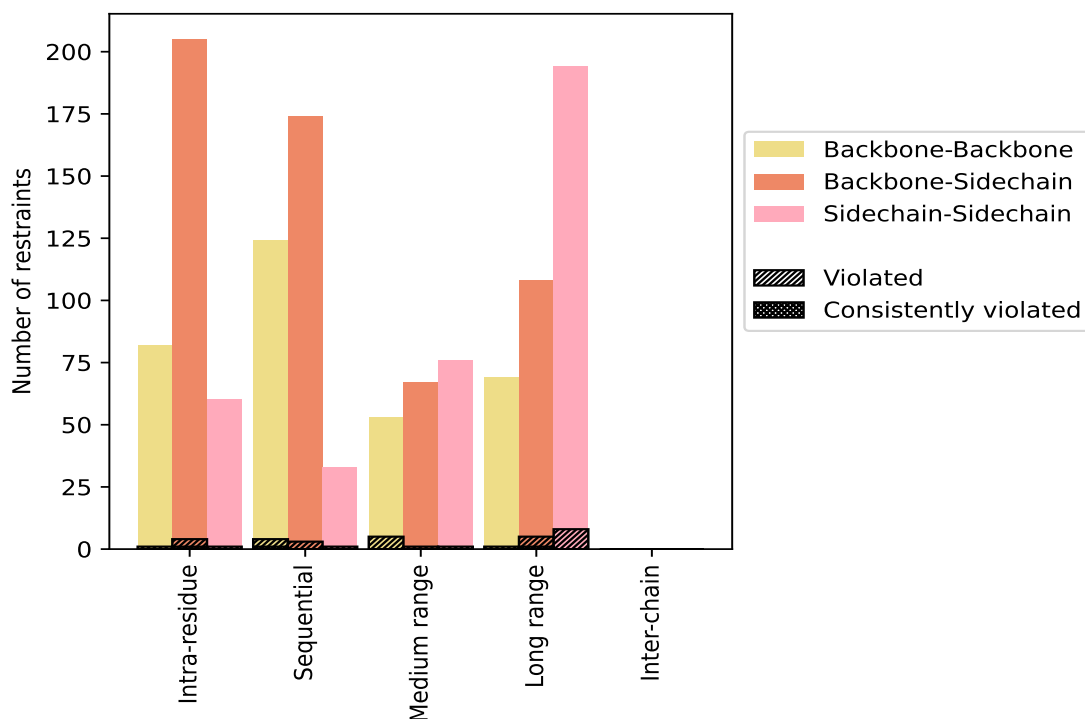
9.1 Summary of distance violations

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	347	27.9	6	1.7	0.5	1	0.3	0.1
Backbone-Backbone	82	6.6	1	1.2	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	205	16.5	4	2.0	0.3	1	0.5	0.1
Sidechain-Sidechain	60	4.8	1	1.7	0.1	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	331	26.6	8	2.4	0.6	1	0.3	0.1
Backbone-Backbone	124	10.0	4	3.2	0.3	1	0.8	0.1
Backbone-Sidechain	174	14.0	3	1.7	0.2	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	33	2.7	1	3.0	0.1	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	174	14.0	2	1.1	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	31	2.5	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	67	5.4	1	1.5	0.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	76	6.1	1	1.3	0.1	0	0.0	0.0
Long range ($i-j \geq 5$)	339	27.2	14	4.1	1.1	1	0.3	0.1
Backbone-Backbone	37	3.0	1	2.7	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	108	8.7	5	4.6	0.4	1	0.9	0.1
Sidechain-Sidechain	194	15.6	8	4.1	0.6	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	54	4.3	5	9.3	0.4	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1245	100.0	35	2.8	2.8	3	0.2	0.2
Backbone-Backbone	328	26.3	11	3.4	0.9	1	0.3	0.1
Backbone-Sidechain	554	44.5	13	2.3	1.0	2	0.4	0.2
Sidechain-Sidechain	363	29.2	11	3.0	0.9	0	0.0	0.0

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

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



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

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

The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	2	3	2	6	0	13	0.39	0.93	0.29	0.28
2	2	4	2	4	0	12	0.42	0.95	0.31	0.27
3	2	2	2	7	0	13	0.41	1.06	0.33	0.24
4	1	3	1	6	0	11	0.44	0.94	0.29	0.29
5	4	3	2	5	0	14	0.28	0.72	0.17	0.26
6	2	3	3	6	0	14	0.43	0.83	0.27	0.39
7	4	3	2	5	0	14	0.29	0.8	0.21	0.21
8	3	4	3	4	0	14	0.38	0.92	0.28	0.3
9	3	3	0	7	0	13	0.33	0.94	0.27	0.18
10	3	2	3	7	0	15	0.34	0.87	0.25	0.31
11	1	4	0	6	0	11	0.44	0.9	0.24	0.38

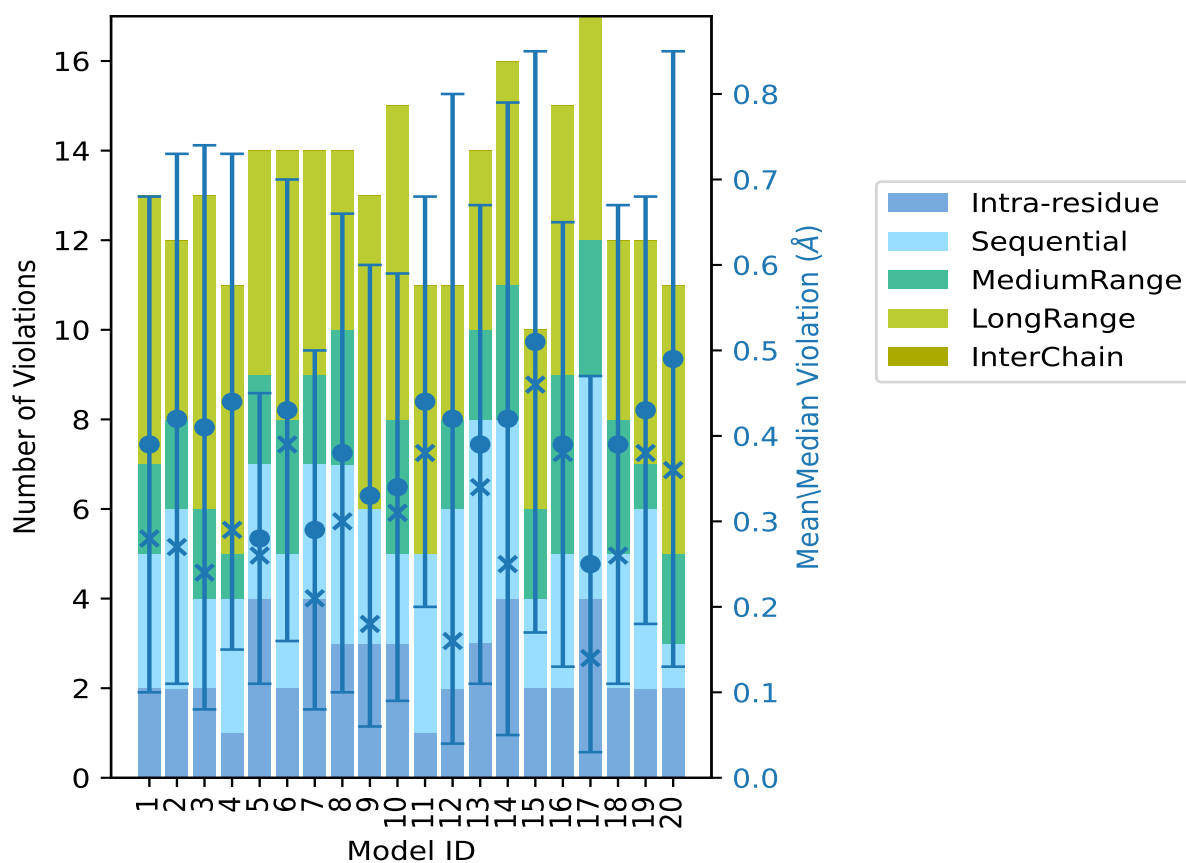
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵					
12	2	4	2	3	0	11	0.42	1.19	0.38	0.16
13	3	5	2	4	0	14	0.39	1.12	0.28	0.34
14	4	4	3	5	0	16	0.42	1.3	0.37	0.25
15	2	2	2	4	0	10	0.51	1.06	0.34	0.46
16	2	3	4	6	0	15	0.39	1.0	0.26	0.38
17	4	5	3	5	0	17	0.25	0.86	0.22	0.14
18	2	3	3	4	0	12	0.39	0.92	0.28	0.26
19	2	4	1	5	0	12	0.43	0.83	0.25	0.38
20	2	1	2	6	0	11	0.49	1.23	0.36	0.36

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints, ⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

9.2.1 Bar graph : Distance 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

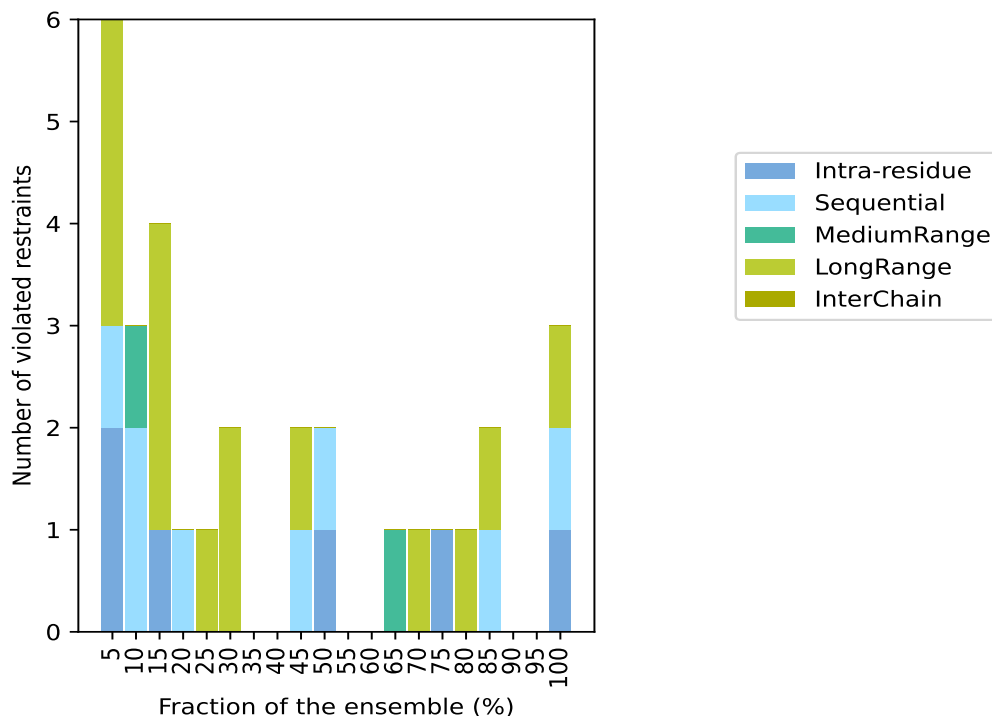
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1161(IR:341, SQ:323, MR:172, LR:325, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

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

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints, ⁵Inter-chain restraints, ⁶ Number of models with violations

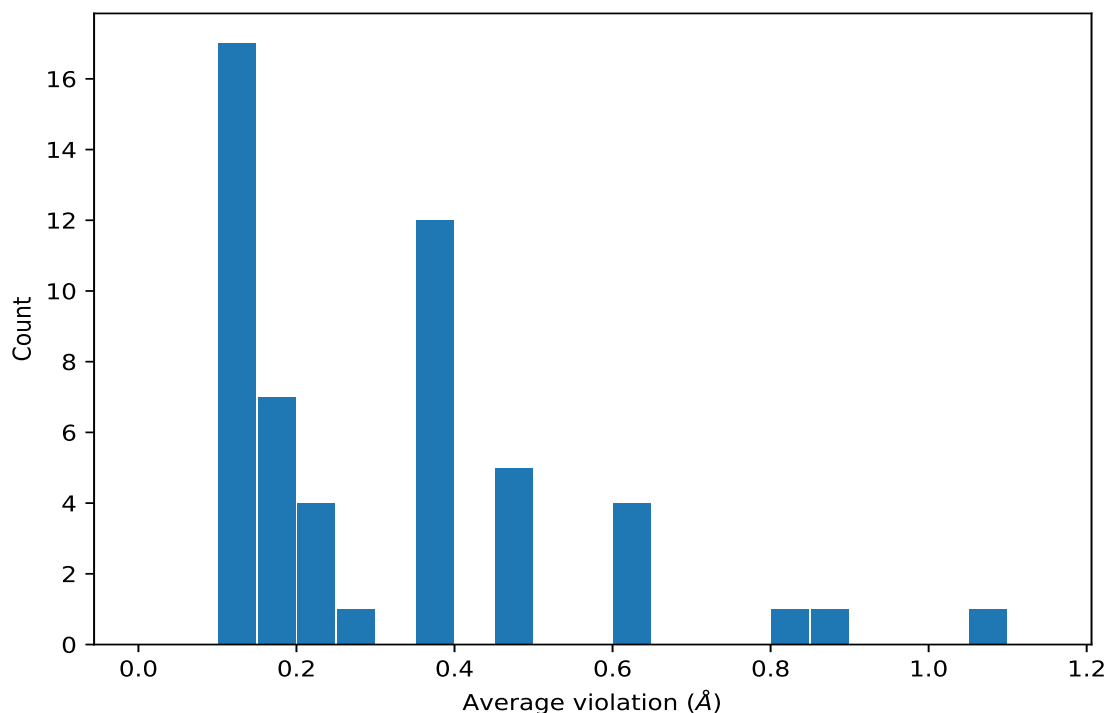
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations [i](#)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints [i](#)

The following table provides the mean and the standard deviation of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	20	0.86	0.14	0.84
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	20	0.6	0.17	0.61
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	20	0.28	0.04	0.28
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	18	0.24	0.1	0.22
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	17	0.64	0.35	0.55
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	17	0.64	0.35	0.55
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	17	0.13	0.01	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	17	0.13	0.01	0.13
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	16	0.35	0.11	0.38
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	16	0.35	0.11	0.38
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	16	0.35	0.11	0.38
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	16	0.35	0.11	0.38
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	16	0.35	0.11	0.38
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	16	0.35	0.11	0.38
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	15	0.62	0.25	0.74
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	14	0.47	0.17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

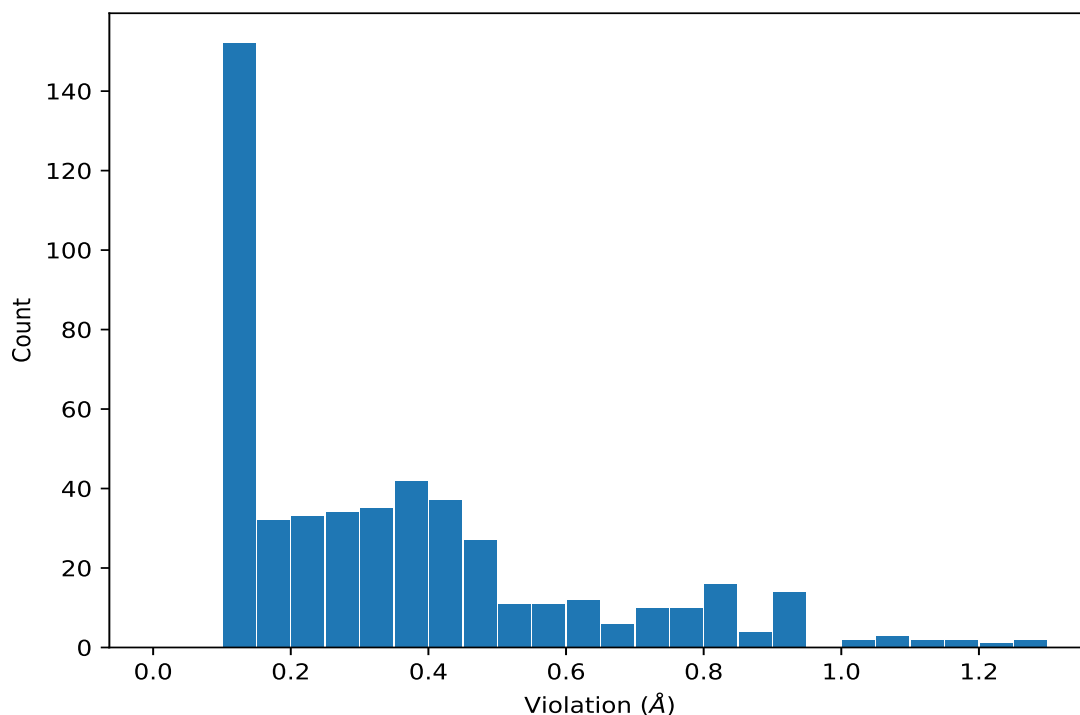
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	14	0.47	0.17	0.44
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	14	0.47	0.17	0.44
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	14	0.47	0.17	0.44
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	13	0.13	0.01	0.13
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	10	0.82	0.2	0.91
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	10	0.13	0.01	0.13
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	9	0.35	0.2	0.25
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	9	0.35	0.2	0.25
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	9	0.12	0.01	0.13
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE1	6	0.15	0.03	0.15
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE2	6	0.15	0.03	0.15
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE3	6	0.15	0.03	0.15
(2,199)	1:A:15:MET:HE1	1:A:63:VAL:HB	6	0.12	0.01	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE2	1:A:63:VAL:HB	6	0.12	0.01	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE3	1:A:63:VAL:HB	6	0.12	0.01	0.12
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	5	0.37	0.06	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB3	5	0.37	0.06	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB2	5	0.37	0.06	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB3	5	0.37	0.06	0.37
(1,54)	1:A:78:VAL:O	1:A:81:VAL:H	5	0.15	0.08	0.11
(2,288)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	4	0.13	0.02	0.12
(2,156)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	3	0.45	0.11	0.44
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB3	3	0.2	0.0	0.2
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	3	0.2	0.0	0.2
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	3	0.12	0.01	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	3	0.12	0.01	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	3	0.12	0.01	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	3	0.12	0.01	0.13
(2,53)	1:A:3:ILE:HG21	1:A:18:THR:H	3	0.12	0.01	0.12
(2,53)	1:A:3:ILE:HG22	1:A:18:THR:H	3	0.12	0.01	0.12
(2,53)	1:A:3:ILE:HG23	1:A:18:THR:H	3	0.12	0.01	0.12
(2,1174)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	2	1.06	0.06	1.06
(2,831)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:60:PHE:H	2	0.22	0.07	0.22
(2,568)	1:A:42:ILE:HG21	1:A:43:ASN:HD21	2	0.17	0.01	0.17
(2,568)	1:A:42:ILE:HG22	1:A:43:ASN:HD21	2	0.17	0.01	0.17
(2,568)	1:A:42:ILE:HG23	1:A:43:ASN:HD21	2	0.17	0.01	0.17
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	2	0.14	0.03	0.14

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations [i](#)

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



9.5.2 Table : All distance violations [i](#)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	14	1.3
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	14	1.3
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	20	1.23
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	12	1.19
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	12	1.19
(2,1174)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	13	1.12
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	14	1.1
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	3	1.06
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	3	1.06
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	12	1.03
(2,1174)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	16	1.0
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	2	0.95
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	2	0.95
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	4	0.94
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	3	0.94
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	9	0.94
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	1	0.93
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	8	0.92
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	18	0.92
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	1	0.91
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	1	0.91
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	2	0.91
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	3	0.91
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	4	0.91
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	11	0.9
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	14	0.88
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	2	0.87
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	10	0.87
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	17	0.86
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	10	0.85
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	15	0.85
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	16	0.85
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	6	0.83
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	6	0.83
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	8	0.83
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	18	0.83
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	19	0.83
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	19	0.81
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	15	0.8
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	15	0.8
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	20	0.8
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	20	0.8
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	20	0.8
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	20	0.8
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	7	0.8
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	20	0.79
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	6	0.79
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	14	0.77
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	20	0.77
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	13	0.77
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	19	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	12	0.76
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	11	0.76
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	11	0.76
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	8	0.75
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	9	0.74
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	17	0.74
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	17	0.74
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	17	0.74
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	17	0.74
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	6	0.74
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	6	0.73
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	6	0.73
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	1	0.73
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	5	0.72
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	11	0.7
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	8	0.69
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	8	0.69
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	4	0.67
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	4	0.67
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	13	0.67
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	18	0.63
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	18	0.63
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	1	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	7	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	7	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	7	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	7	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	15	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	15	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	15	0.63
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	15	0.63
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	4	0.62
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	19	0.6
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	10	0.6
(2,1152)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	16	0.6
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	9	0.59
(2,156)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	20	0.59
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	12	0.58
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	12	0.58
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	2	0.57
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	18	0.57
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	16	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	16	0.55
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	3	0.53
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	13	0.53
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	13	0.53
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	5	0.51
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	5	0.51
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	5	0.51
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	5	0.51
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	5	0.51
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	5	0.51
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	4	0.5
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	4	0.5
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	7	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	7	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	7	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	7	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	7	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	7	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	18	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	18	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	18	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	18	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	18	0.49
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	18	0.49
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	9	0.49
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	9	0.49
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	9	0.49
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	9	0.49
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	10	0.49
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	10	0.49
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	16	0.46
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	6	0.46
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	6	0.46
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	6	0.46
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	6	0.46
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	2	0.45
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	2	0.45
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	2	0.45
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	2	0.45
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	6	0.44
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	6	0.44
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	6	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	6	0.44
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	6	0.44
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	6	0.44
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	16	0.44
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB3	16	0.44
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB2	16	0.44
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB3	16	0.44
(2,156)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	11	0.44
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	3	0.43
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	3	0.43
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	3	0.43
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	3	0.43
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	11	0.42
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	11	0.42
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	11	0.42
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	11	0.42
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	11	0.42
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	11	0.42
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	5	0.42
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	5	0.42
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	5	0.42
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	5	0.42
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	16	0.4
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	16	0.4
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	16	0.4
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	16	0.4
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	16	0.4
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	16	0.4
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	14	0.4
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	19	0.4
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB3	19	0.4
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB2	19	0.4
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB3	19	0.4
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	8	0.4
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	10	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	10	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	10	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	10	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	10	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	10	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	19	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	19	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	19	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	19	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	19	0.39
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	19	0.39
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	5	0.39
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	5	0.39
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	7	0.38
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	11	0.38
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	16	0.38
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	16	0.38
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	16	0.38
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	16	0.38
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	13	0.38
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	14	0.38
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	19	0.37
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	19	0.37
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	19	0.37
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	19	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	1	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB3	1	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB2	1	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB3	1	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	13	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB3	13	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB2	13	0.37
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB3	13	0.37
(2,606)	1:A:44:ASP:H	1:A:45:ILE:HG12	17	0.36
(2,606)	1:A:44:ASP:H	1:A:45:ILE:HG13	17	0.36
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	20	0.36
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	20	0.36
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	20	0.36
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	20	0.36
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	20	0.36
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	20	0.36
(2,830)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:57:VAL:HA	13	0.35
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	9	0.35
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	9	0.35
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	1	0.35
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	13	0.34
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	10	0.34
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	10	0.34
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	10	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	10	0.34
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	6	0.34
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	8	0.34
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	13	0.34
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	8	0.33
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	8	0.33
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	8	0.33
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	8	0.33
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	8	0.33
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	8	0.33
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	11	0.33
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	11	0.33
(2,156)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	6	0.33
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	7	0.33
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	5	0.32
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	17	0.32
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	10	0.32
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	11	0.32
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	14	0.32
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	11	0.31
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	11	0.31
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	11	0.31
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	11	0.31
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	16	0.31
(1,54)	1:A:78:VAL:O	1:A:81:VAL:H	18	0.31
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	5	0.31
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	10	0.31
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	7	0.3
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	17	0.29
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	4	0.29
(2,831)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:60:PHE:H	14	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	2	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	2	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	2	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	2	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	2	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	2	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	15	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	15	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	15	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	15	0.28
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	15	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	15	0.28
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	1	0.28
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	7	0.28
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	12	0.28
(2,445)	1:A:34:VAL:HA	1:A:43:ASN:HD21	5	0.27
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	3	0.27
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	9	0.27
(2,481)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HE22	8	0.26
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	2	0.26
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	5	0.26
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	15	0.26
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	20	0.26
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	19	0.25
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	19	0.25
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	4	0.25
(2,19)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB3	4	0.25
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB2	4	0.25
(2,19)	1:A:2:LYS:HD3	1:A:83:GLU:HB3	4	0.25
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	19	0.25
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	3	0.24
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	3	0.24
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	3	0.24
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	3	0.24
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	3	0.24
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	3	0.24
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	3	0.24
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	2	0.23
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	4	0.22
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	4	0.22
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	4	0.22
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	4	0.22
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	4	0.22
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	4	0.22
(2,452)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:46:LEU:H	14	0.22
(2,452)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:46:LEU:H	14	0.22
(2,452)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:46:LEU:H	14	0.22
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	18	0.22
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	6	0.21
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	17	0.2
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	17	0.2
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	17	0.2
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	17	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	17	0.2
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	17	0.2
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE1	1	0.2
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE2	1	0.2
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE3	1	0.2
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB3	3	0.2
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	3	0.2
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB3	10	0.2
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	10	0.2
(2,138)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	17	0.2
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	1	0.19
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	1	0.19
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	14	0.19
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	14	0.19
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE1	16	0.19
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE2	16	0.19
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE3	16	0.19
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB3	8	0.19
(2,178)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	8	0.19
(2,568)	1:A:42:ILE:HG21	1:A:43:ASN:HD21	14	0.18
(2,568)	1:A:42:ILE:HG22	1:A:43:ASN:HD21	14	0.18
(2,568)	1:A:42:ILE:HG23	1:A:43:ASN:HD21	14	0.18
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	9	0.18
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	9	0.18
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	19	0.18
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	20	0.18
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	16	0.17
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	10	0.16
(2,568)	1:A:42:ILE:HG21	1:A:43:ASN:HD21	12	0.16
(2,568)	1:A:42:ILE:HG22	1:A:43:ASN:HD21	12	0.16
(2,568)	1:A:42:ILE:HG23	1:A:43:ASN:HD21	12	0.16
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG11	13	0.16
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG12	13	0.16
(2,513)	1:A:39:PRO:HD2	1:A:81:VAL:HG13	13	0.16
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG11	13	0.16
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG12	13	0.16
(2,513)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:81:VAL:HG13	13	0.16
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB2	4	0.16
(2,405)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:36:ASP:HB3	4	0.16
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB2	4	0.16
(2,405)	1:A:31:TYR:HE2	1:A:36:ASP:HB3	4	0.16
(2,288)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	19	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	5	0.15
(2,831)	1:A:56:HIS:HD2	1:A:60:PHE:H	8	0.15
(2,439)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	14	0.15
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE1	14	0.15
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE2	14	0.15
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE3	14	0.15
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	11	0.15
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	4	0.15
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	15	0.15
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	16	0.15
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	1	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	1	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	2	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	2	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	4	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	4	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	10	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	10	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	13	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	13	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	17	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	17	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	18	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	18	0.14
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	7	0.14
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	12	0.14
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE1	17	0.14
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE2	17	0.14
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE3	17	0.14
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	18	0.14
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	18	0.14
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	1	0.14
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	5	0.14
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	17	0.14
(2,1139)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG11	18	0.14
(2,1139)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG12	18	0.14
(2,1139)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG13	18	0.14
(2,1139)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	18	0.14
(2,1139)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	18	0.14
(2,1139)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	18	0.14
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	3	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	3	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	9	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	9	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	11	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	11	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	12	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	12	0.13
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	2	0.13
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	3	0.13
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	8	0.13
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	18	0.13
(2,53)	1:A:3:ILE:HG21	1:A:18:THR:H	10	0.13
(2,53)	1:A:3:ILE:HG22	1:A:18:THR:H	10	0.13
(2,53)	1:A:3:ILE:HG23	1:A:18:THR:H	10	0.13
(2,491)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD21	6	0.13
(2,491)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD21	6	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	7	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	7	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	7	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	7	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	17	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	17	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	17	0.13
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	17	0.13
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE1	3	0.13
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE2	3	0.13
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE3	3	0.13
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	7	0.13
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	7	0.13
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	7	0.13
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	8	0.13
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	9	0.13
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	12	0.13
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	14	0.13
(2,199)	1:A:15:MET:HE1	1:A:63:VAL:HB	3	0.13
(2,199)	1:A:15:MET:HE2	1:A:63:VAL:HB	3	0.13
(2,199)	1:A:15:MET:HE3	1:A:63:VAL:HB	3	0.13
(2,199)	1:A:15:MET:HE1	1:A:63:VAL:HB	5	0.13
(2,199)	1:A:15:MET:HE2	1:A:63:VAL:HB	5	0.13
(2,199)	1:A:15:MET:HE3	1:A:63:VAL:HB	5	0.13
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	2	0.13
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	5	0.13
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	17	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	19	0.13
(1,54)	1:A:78:VAL:O	1:A:81:VAL:H	20	0.13
(1,39)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:N	16	0.13
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	12	0.13
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	18	0.13
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	6	0.12
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	6	0.12
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	14	0.12
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	14	0.12
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	1	0.12
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	16	0.12
(2,541)	1:A:41:PHE:HZ	1:A:84:LEU:HD11	20	0.12
(2,541)	1:A:41:PHE:HZ	1:A:84:LEU:HD12	20	0.12
(2,541)	1:A:41:PHE:HZ	1:A:84:LEU:HD13	20	0.12
(2,53)	1:A:3:ILE:HG21	1:A:18:THR:H	7	0.12
(2,53)	1:A:3:ILE:HG22	1:A:18:THR:H	7	0.12
(2,53)	1:A:3:ILE:HG23	1:A:18:THR:H	7	0.12
(2,288)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	2	0.12
(2,288)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	17	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE1	1:A:63:VAL:HB	1	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE2	1:A:63:VAL:HB	1	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE3	1:A:63:VAL:HB	1	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE1	1:A:63:VAL:HB	10	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE2	1:A:63:VAL:HB	10	0.12
(2,199)	1:A:15:MET:HE3	1:A:63:VAL:HB	10	0.12
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	12	0.12
(1,18)	1:A:40:ALA:O	1:A:43:ASN:H	17	0.12
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	5	0.11
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	5	0.11
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	7	0.11
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	7	0.11
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	8	0.11
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	8	0.11
(2,859)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	16	0.11
(2,859)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	16	0.11
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	6	0.11
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	13	0.11
(2,846)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	14	0.11
(2,53)	1:A:3:ILE:HG21	1:A:18:THR:H	9	0.11
(2,53)	1:A:3:ILE:HG22	1:A:18:THR:H	9	0.11
(2,53)	1:A:3:ILE:HG23	1:A:18:THR:H	9	0.11
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	5	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,484)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	5	0.11
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	5	0.11
(2,484)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	5	0.11
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE1	9	0.11
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE2	9	0.11
(2,4)	1:A:1:MET:HA	1:A:26:MET:HE3	9	0.11
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	17	0.11
(2,331)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB3	17	0.11
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	10	0.11
(2,299)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	13	0.11
(2,288)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	8	0.11
(2,214)	1:A:16:LYS:HA	1:A:62:SER:H	9	0.11
(2,199)	1:A:15:MET:HE1	1:A:63:VAL:HB	15	0.11
(2,199)	1:A:15:MET:HE2	1:A:63:VAL:HB	15	0.11
(2,199)	1:A:15:MET:HE3	1:A:63:VAL:HB	15	0.11
(2,199)	1:A:15:MET:HE1	1:A:63:VAL:HB	20	0.11
(2,199)	1:A:15:MET:HE2	1:A:63:VAL:HB	20	0.11
(2,199)	1:A:15:MET:HE3	1:A:63:VAL:HB	20	0.11
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	7	0.11
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	9	0.11
(2,1031)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	13	0.11
(1,54)	1:A:78:VAL:O	1:A:81:VAL:H	6	0.11
(1,54)	1:A:78:VAL:O	1:A:81:VAL:H	15	0.11
(1,54)	1:A:78:VAL:O	1:A:81:VAL:H	17	0.11
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	10	0.11
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	17	0.11

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

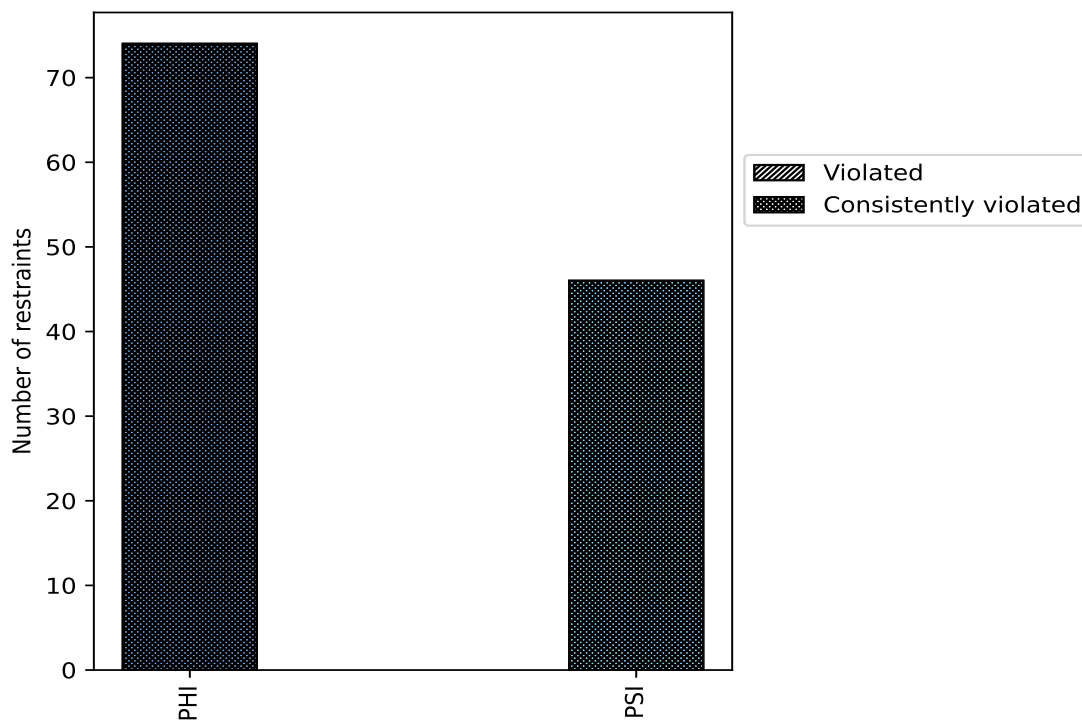
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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	74	61.7	74	100.0	61.7	74	100.0	61.7
PSI	46	38.3	46	100.0	38.3	46	100.0	38.3
Total	120	100.0	120	100.0	100.0	120	100.0	100.0

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

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



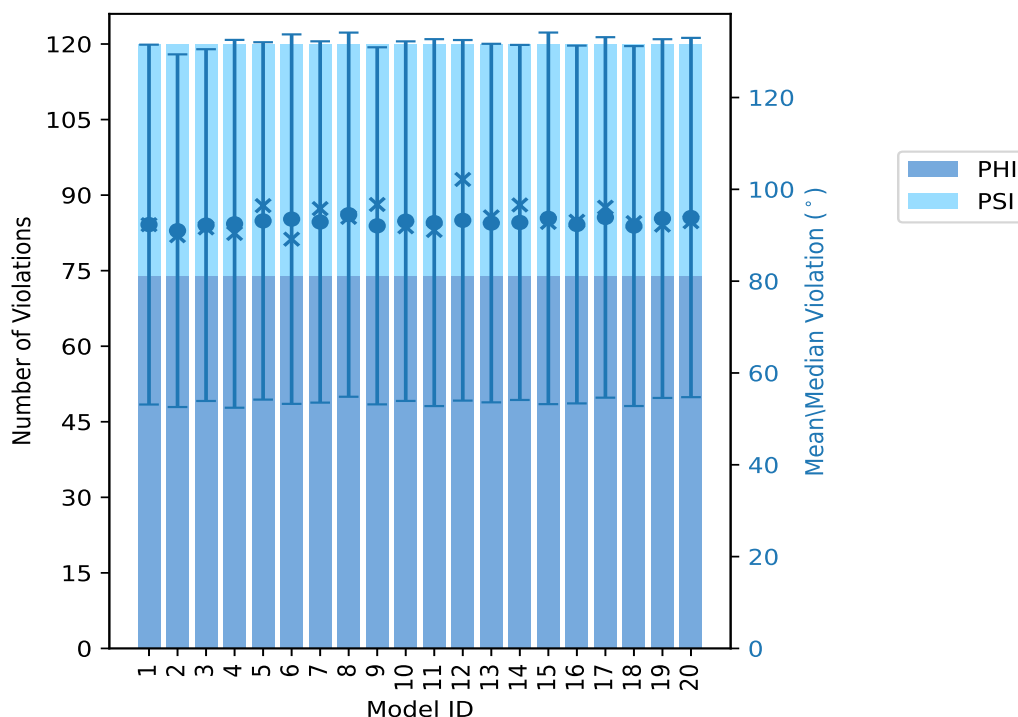
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	74	46	120	92.32	164.1	39.19	92.3
2	74	46	120	90.99	173.5	38.41	89.9
3	74	46	120	92.21	160.6	38.31	91.6
4	74	46	120	92.49	164.1	40.06	90.4
5	74	46	120	93.12	165.3	38.92	96.45
6	74	46	120	93.51	166.2	40.24	89.15
7	74	46	120	92.89	163.1	39.35	95.8
8	74	46	120	94.48	165.7	39.66	93.9
9	74	46	120	92.05	162.8	38.89	96.7
10	74	46	120	93.07	164.4	39.16	91.85
11	74	46	120	92.75	166.6	39.96	91.05
12	74	46	120	93.25	171.0	39.27	102.15
13	74	46	120	92.65	166.2	39.05	94.0
14	74	46	120	92.79	162.1	38.67	96.6
15	74	46	120	93.68	164.4	40.47	92.8
16	74	46	120	92.34	161.3	38.97	93.05
17	74	46	120	93.88	174.6	39.26	96.1
18	74	46	120	92.0	166.4	39.2	92.75
19	74	46	120	93.63	171.2	39.07	92.2
20	74	46	120	93.86	166.8	39.13	92.95

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	%
0	0	0	1	5.0
0	0	0	2	10.0
0	0	0	3	15.0
0	0	0	4	20.0
0	0	0	5	25.0
0	0	0	6	30.0
0	0	0	7	35.0
0	0	0	8	40.0
0	0	0	9	45.0
0	0	0	10	50.0
0	0	0	11	55.0

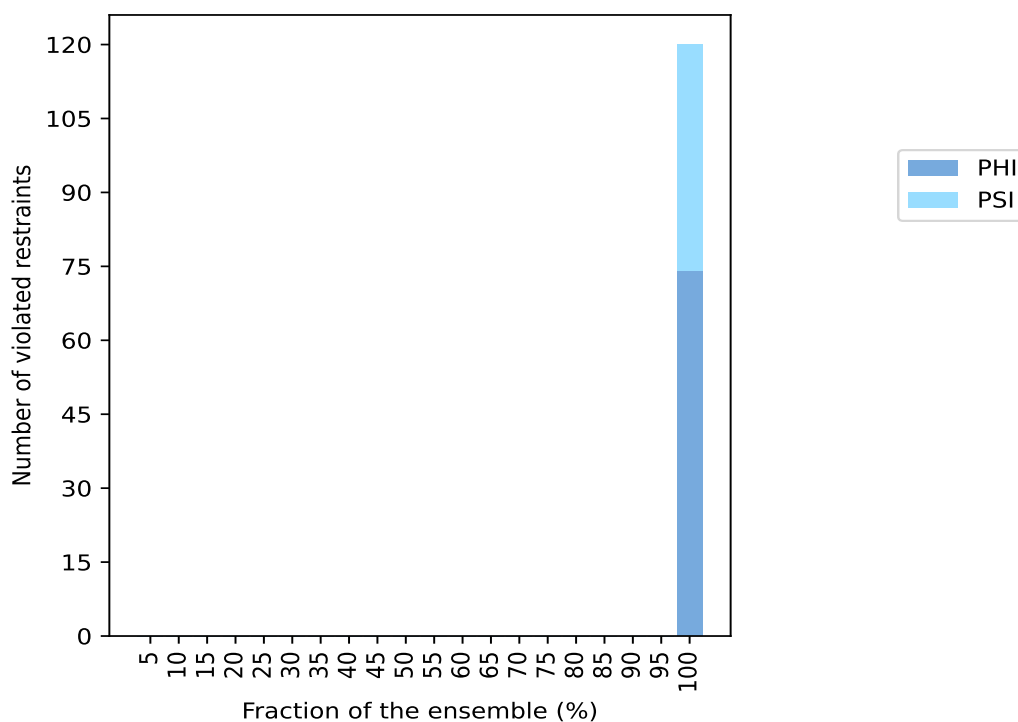
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
0	0	0	12	60.0
0	0	0	13	65.0
0	0	0	14	70.0
0	0	0	15	75.0
0	0	0	16	80.0
0	0	0	17	85.0
0	0	0	18	90.0
0	0	0	19	95.0
74	46	120	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

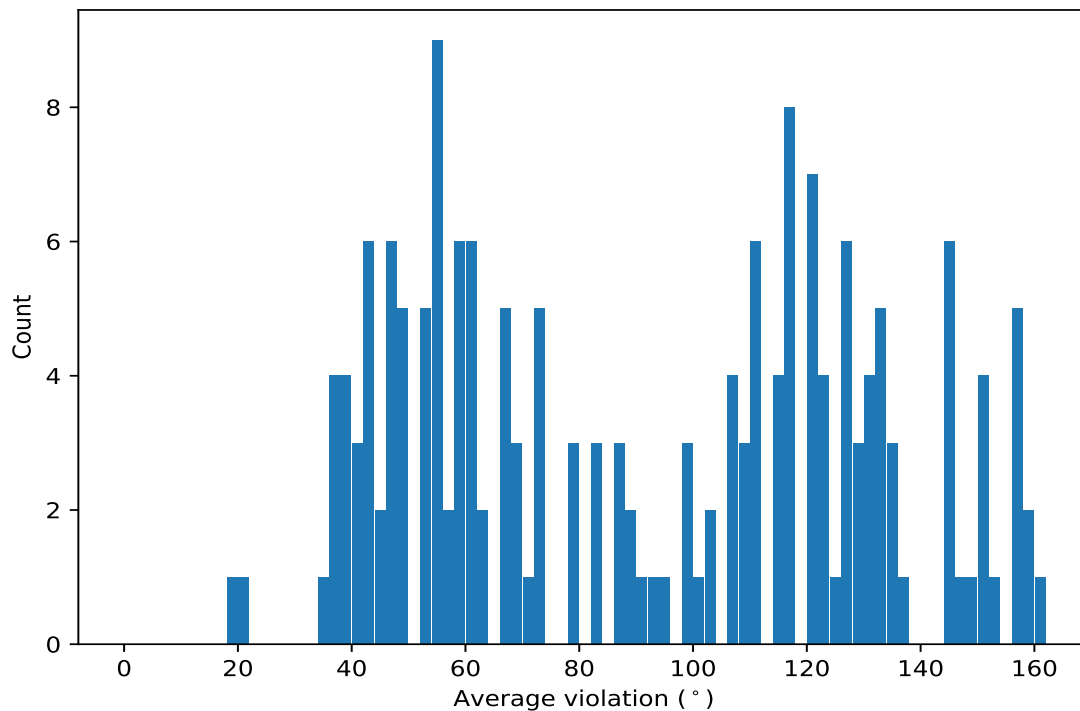


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	20	160.79	3.81	160.85
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	20	159.02	13.37	159.7
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	20	158.54	6.5	159.65
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	20	157.88	6.02	160.2
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	20	157.2	3.61	157.7
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	20	157.2	3.61	157.7
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	20	157.07	5.45	156.25
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	20	157.07	5.45	156.25
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	20	153.37	7.41	154.75
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	20	151.92	3.33	151.95
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	20	151.89	3.56	152.35
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	20	150.62	6.36	151.7
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	20	150.62	6.36	151.7
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	20	148.44	7.1	150.9
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	20	147.3	4.93	146.05
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	20	145.93	9.1	146.75
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	20	145.93	9.1	146.75
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	20	145.8	4.75	147.6
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	20	145.8	4.75	147.6
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	20	145.38	3.26	146.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	20	144.89	14.3	148.55
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	20	137.8	5.77	139.15
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	20	135.07	2.44	135.55
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	20	135.07	2.44	135.55
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	20	134.38	8.71	133.1
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	20	132.7	9.6	128.5
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	20	132.7	9.6	128.5
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	20	132.7	18.25	135.05
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	20	132.27	9.66	136.5
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	20	132.27	9.66	136.5
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	20	130.57	2.02	131.0
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	20	130.57	2.02	131.0
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	20	130.54	8.46	130.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	20	130.54	8.46	130.2
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	20	129.11	2.75	129.35
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	20	129.11	2.75	129.35
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	20	129.0	3.45	130.15
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	20	127.69	3.88	128.7
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	20	127.69	3.88	128.7
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	20	126.76	1.89	126.1
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	20	126.46	3.46	125.75
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	20	126.08	7.09	127.85
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	20	126.08	7.09	127.85
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	20	125.26	6.11	125.15
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	20	123.3	4.66	122.7
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	20	123.3	4.66	122.7
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	20	123.22	1.71	123.4
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	20	122.58	2.9	122.25
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	20	121.53	8.95	119.55
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	20	121.21	4.3	121.85
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	20	121.21	4.3	121.85
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	20	121.1	6.33	123.4
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	20	121.1	6.33	123.4
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	20	120.39	3.57	121.5
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	20	120.39	3.57	121.5
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	20	117.72	6.92	117.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	20	117.72	6.92	117.9
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	20	117.66	2.61	117.8
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	20	117.5	6.64	117.45
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	20	117.21	4.45	118.25
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	20	117.21	4.45	118.25
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	20	116.67	3.68	116.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	20	116.67	3.68	116.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	20	115.87	5.4	116.3
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	20	115.87	5.4	116.3
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	20	114.7	14.6	108.1
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	20	114.46	12.1	111.45
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	20	111.72	6.92	108.45
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	20	111.72	6.92	108.45
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	20	111.01	4.71	110.05
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	20	110.84	22.27	113.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	20	110.53	6.48	108.45
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	20	110.53	6.48	108.45
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	20	108.94	3.81	109.45
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	20	108.94	3.81	109.45
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	20	108.71	6.03	109.8
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	20	106.64	5.93	106.15
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	20	106.64	5.93	106.15
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	20	106.02	4.51	105.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	20	106.02	4.51	105.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	20	103.1	3.08	102.95
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	20	103.1	3.08	102.95
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	20	100.37	3.74	100.85
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	20	99.2	22.24	91.25
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	20	99.2	22.24	91.25
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	20	99.1	5.62	100.15
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	20	95.58	5.05	97.45
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	20	93.04	2.36	92.2
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	20	91.36	7.1	91.45
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	20	88.66	4.51	87.3
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	20	88.59	15.74	91.9
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	20	86.93	14.54	83.05
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	86.3	6.49	85.85
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	86.3	6.49	85.85
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	20	83.76	17.14	81.9
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	20	83.7	2.12	84.5
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	20	83.7	2.12	84.5
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	20	78.85	5.19	78.25
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	20	78.85	19.36	73.0
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	20	78.26	4.67	80.5
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	20	72.92	1.52	72.9
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	20	72.54	5.87	72.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	20	72.49	5.19	72.2
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	20	72.49	5.19	72.2
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	20	72.15	9.33	70.15
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	20	71.89	9.48	73.0
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	20	68.42	1.08	68.35
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	20	68.07	1.5	68.4
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	20	68.07	1.5	68.4
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	20	67.74	12.08	63.75
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	20	67.13	1.04	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	20	67.13	1.04	67.3
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	20	66.85	10.46	63.45
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	20	66.48	1.15	67.05
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	20	63.04	0.98	63.2
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	20	63.04	0.98	63.2
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	20	61.89	14.43	56.25
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	20	61.22	1.61	61.3
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	20	61.22	1.61	61.3
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	20	60.77	2.58	61.7
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	20	60.08	3.14	59.65
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	20	60.08	3.14	59.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	20	59.74	2.98	59.95
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	20	59.27	2.84	58.95
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	20	59.27	2.84	58.95
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	20	58.52	8.01	52.85
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	20	58.52	8.01	52.85
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	20	58.1	1.42	58.3
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	20	56.92	6.05	55.05
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	20	56.92	6.05	55.05
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	20	55.86	3.45	55.1
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	20	55.86	3.45	55.1
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	20	55.85	4.07	55.9
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	20	55.75	2.06	55.8
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	20	55.75	2.06	55.8
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	20	54.92	1.01	54.85
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	20	54.92	1.01	54.85
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	20	54.58	1.89	54.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	20	54.58	1.89	54.7
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	20	53.73	9.38	54.6
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	20	53.56	1.24	53.45
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	20	53.56	1.24	53.45
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	53.4	1.89	54.1
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	53.4	1.89	54.1
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	20	49.32	0.48	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	20	49.32	0.48	49.4
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	20	49.32	2.48	49.7
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	20	48.5	1.1	48.8
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	20	48.5	1.1	48.8
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	20	47.97	3.54	48.25
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	20	47.97	3.54	48.25
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	46.61	1.16	46.65
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	46.61	1.16	46.65
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	20	46.04	2.48	45.25
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	20	46.04	2.48	45.25
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	20	44.64	3.2	44.95
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	20	44.64	3.2	44.95
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	20	43.78	12.35	38.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	20	43.77	1.43	43.6
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	20	43.77	1.43	43.6
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	20	43.6	4.61	45.35
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	20	42.04	2.72	42.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	20	42.04	2.72	42.7
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	20	41.9	2.1	41.85
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	20	41.9	2.1	41.85
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	20	41.26	3.11	42.4
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	20	39.67	0.5	39.55
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	20	39.32	2.49	39.65
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	20	39.32	2.49	39.65
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	20	38.07	1.17	38.3
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	20	37.13	1.58	36.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	20	37.13	1.58	36.8
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	20	36.77	1.96	36.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

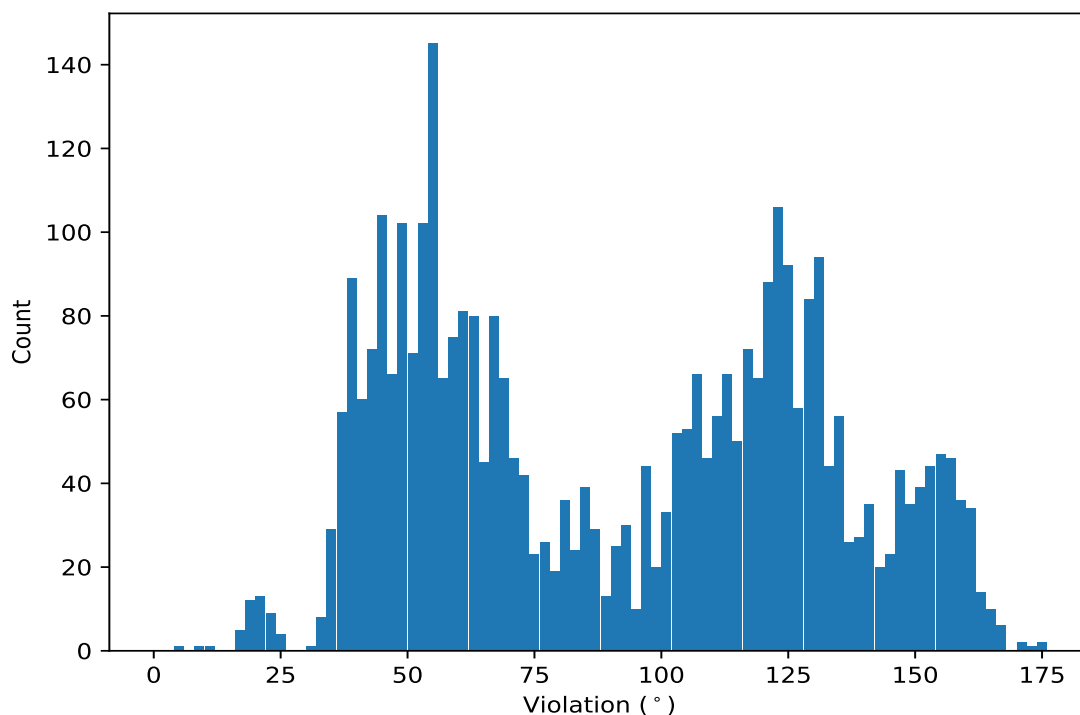
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	20	36.77	1.96	36.75
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	20	35.53	14.13	43.9
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	20	21.74	2.13	21.7
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	20	19.28	2.87	19.7

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 (°)
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	17	174.6
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	17	174.6
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	2	173.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	19	171.2
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	12	171.0
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	20	166.8
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	11	166.6
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	17	166.4
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	18	166.4
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	6	166.2
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	13	166.2
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	8	165.7
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	5	165.3
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	6	165.0
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	15	164.4
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	164.4
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	164.4
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	11	164.3
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1	164.1
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	8	164.1
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	4	164.1
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	15	163.9
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	18	163.8
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	13	163.4
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	10	163.1
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	7	163.1
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	19	162.8
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	9	162.8
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	20	162.6
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	17	162.5
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	15	162.3
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	14	162.1
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	17	162.0
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	19	162.0
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	17	162.0
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	12	161.5
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	19	161.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	9	161.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	9	161.5
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	19	161.4
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	16	161.3
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	1	161.1
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	11	160.9
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	11	160.9
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	18	160.9
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	4	160.8
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	12	160.8
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	9	160.7
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	11	160.6
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	3	160.6
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	15	160.6
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	7	160.5
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	7	160.5
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	7	160.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	10	160.4
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1	160.4
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1	160.4
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	12	160.4
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	9	160.4
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	12	160.3
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	12	160.3
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	5	160.2
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	6	160.2
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	14	160.2
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	7	160.1
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	7	160.1
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	16	160.1
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	16	160.1
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	2	160.1
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	6	159.9
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	6	159.9
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	14	159.9
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	14	159.9
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1	159.8
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	11	159.7
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	9	159.7
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	5	159.6
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	4	159.6
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	8	159.6
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	4	159.5
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	5	159.4
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	8	159.0
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	8	159.0
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	16	159.0
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	10	159.0
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	6	158.9
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	16	158.9
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	14	158.9
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	18	158.8
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	6	158.7
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	6	158.7
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	17	158.7
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	17	158.7
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	4	158.6
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	4	158.6
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	7	158.6
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	15	158.3
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	15	158.3
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	20	158.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	11	158.2
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	11	158.2
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	19	158.1
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	4	158.1
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	4	158.1
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	20	158.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	16	157.8
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	16	157.8
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1	157.8
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	11	157.6
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	11	157.6
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	18	157.6
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	18	157.6
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	6	157.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	6	157.3
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	20	157.3
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	20	157.3
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	12	157.3
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	12	157.2
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	7	157.2
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	5	157.1
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	5	157.1
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	3	157.0
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	17	157.0
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	17	157.0
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	10	156.9
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	13	156.9
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	13	156.9
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	13	156.9
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	6	156.7
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	2	156.7
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	2	156.7
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	8	156.7
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	2	156.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	12	156.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	12	156.5
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	10	156.5
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	2	156.4
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	5	156.4
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	20	156.4
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	8	156.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	8	156.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	10	156.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	10	156.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	5	156.2
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	5	156.2
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	15	156.2
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	15	156.2
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	3	156.1
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	15	156.1
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	4	156.1
(1,110)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	3	156.0
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	4	155.9
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1	155.9
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1	155.9
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	9	155.8
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	9	155.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	3	155.7
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	2	155.6
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	15	155.5
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	14	155.5
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	15	155.4
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	16	155.4
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	8	155.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1	155.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1	155.3
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	6	155.2
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	7	155.1
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1	155.1
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1	155.1
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1	155.1
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	14	154.9
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	14	154.9
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	20	154.9
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	7	154.9
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	7	154.9
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	11	154.9
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	5	154.8
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	5	154.8
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	3	154.7
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	17	154.6
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	2	154.6
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	8	154.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	18	154.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	18	154.5
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	10	154.4
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	2	154.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	2	154.3
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	19	154.2
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	16	154.2
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	16	154.2
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	4	154.2
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	4	154.2
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	4	154.2
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	7	154.2
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	6	154.1
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	20	154.1
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	20	154.1
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	13	154.0
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	19	153.9
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	19	153.9
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	16	153.8
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	15	153.8
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	15	153.8
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	12	153.8
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	11	153.7
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	19	153.7
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	4	153.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	7	153.6
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	14	153.6
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	5	153.5
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	13	153.4
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	13	153.4
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	13	153.4
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	15	153.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	15	153.3
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	16	153.3
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	20	153.3
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	20	153.3
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	13	153.2
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	13	153.2
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	10	153.1
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	4	152.9
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	4	152.9
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	3	152.8
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	3	152.8
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	9	152.8
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	8	152.8
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	3	152.7
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	3	152.7
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	17	152.6
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	6	152.5
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	6	152.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	19	152.5
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	19	152.5
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	15	152.4
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	20	152.2
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	12	152.1
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	18	152.1
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	8	152.1
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	20	152.1
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	13	152.1
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	18	152.1
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	14	151.9
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	19	151.8
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	19	151.8
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	16	151.8
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	3	151.7
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	13	151.6
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	18	151.6
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	8	151.6
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	8	151.6
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	3	151.6
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	8	151.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	7	151.4
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	7	151.4
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	19	151.4
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	19	151.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	3	151.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	9	151.3
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	9	151.3
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	13	151.2
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	13	151.2
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	14	151.2
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	14	151.2
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	20	151.0
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	16	151.0
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1	150.9
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	11	150.9
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	3	150.8
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	3	150.8
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	1	150.6
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	15	150.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	8	150.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	8	150.3
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	11	150.3
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	15	150.3
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	19	150.2
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	4	150.2
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1	150.1
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	12	150.0
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	12	150.0
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	17	149.9
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	17	149.9
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	6	149.9
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	3	149.8
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	18	149.8
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	18	149.8
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	20	149.7
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	9	149.7
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	9	149.7
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	11	149.7
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	11	149.7
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	5	149.7
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	11	149.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	20	149.3
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	18	149.3
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	18	149.3
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	7	149.2
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	16	149.2
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	16	149.2
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	5	149.1
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	9	149.1
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	19	149.0
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	19	149.0
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	10	148.8
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	14	148.8
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	4	148.6
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	10	148.5
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	10	148.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	5	148.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	5	148.5
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	10	148.4
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	12	148.4
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	12	148.2
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	12	148.2
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	2	148.0
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	18	147.9
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	4	147.9
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1	147.8
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1	147.8
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	16	147.7
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	15	147.7
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	15	147.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	10	147.6
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	10	147.6
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	4	147.6
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	5	147.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	2	147.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	2	147.5
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	19	147.4
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	20	147.4
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	18	147.4
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	18	147.4
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	7	147.3
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	18	147.3
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	15	147.3
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	8	147.2
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	2	147.1
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	2	147.1
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1	147.1
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	15	146.9
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	15	146.9
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	6	146.9
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	2	146.8
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	11	146.7
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	11	146.7
(1,117)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1	146.7
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	10	146.6
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	8	146.6
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	8	146.6
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	14	146.5
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	8	146.5
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	9	146.5
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	3	146.4
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	3	146.4
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	14	146.3
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	14	146.3
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	14	146.3
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	2	146.1
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	6	145.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	6	145.8
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	19	145.8
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	19	145.8
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	2	145.8
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	13	145.8
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	11	145.6
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	6	145.5
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	6	145.5
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	17	145.5
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	15	145.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1	145.3
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	6	145.3
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	11	145.3
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	13	145.2
(1,12)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	13	145.2
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	11	145.1
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	9	145.1
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	3	144.9
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	16	144.6
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	9	144.5
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	9	144.5
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	14	144.5
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	10	143.9
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	9	143.7
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	20	143.6
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	20	143.6
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	12	143.5
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	12	143.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	4	143.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	4	143.5
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	7	143.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	13	143.0
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	11	142.6
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	11	142.6
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	17	142.6
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	20	142.4
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	20	142.4
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	13	142.3
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	11	142.1
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	5	142.0
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	12	142.0
(1,104)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	4	142.0
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	6	141.9
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	13	141.9
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	17	141.9
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	17	141.9
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	15	141.6
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	15	141.6
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	16	141.6
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	18	141.5
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	13	141.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	13	141.4
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	14	141.3
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	6	141.2
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	6	141.2
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	8	141.2
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1	141.1
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1	141.1
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	18	141.0
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	18	141.0
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	19	141.0
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	20	140.9
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	4	140.9
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	4	140.9
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	3	140.8
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	18	140.7
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	5	140.6
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	12	140.6
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1	140.4
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	13	140.3
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	14	140.2
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	14	140.2
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	11	140.1
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	11	140.1
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	7	140.0
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	7	140.0
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	10	140.0
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	20	139.9
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	20	139.9
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	18	139.5
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	18	139.5
(1,112)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	13	139.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	8	139.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	8	139.5
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	16	139.3
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	3	139.1
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	3	139.1
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	6	139.1
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	6	139.1
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	14	139.0
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	13	138.9
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	8	138.8
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	2	138.8
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	2	138.8
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	6	138.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	6	138.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	8	138.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	8	138.6
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	7	138.6
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	18	138.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	4	138.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	4	138.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	5	138.2
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	5	138.2
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	16	137.9
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	16	137.9
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	16	137.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	16	137.6
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	19	137.6
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	19	137.6
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	10	137.5
(1,10)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	10	137.5
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	7	137.4
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	14	137.3
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	14	137.3
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	9	137.3
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	9	137.3
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	2	137.2
(1,109)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	5	137.2
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	9	136.9
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	9	136.9
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	17	136.7
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	5	136.4
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	6	136.3
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	6	136.3
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	15	136.2
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	19	136.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	6	136.1
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	4	136.0
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	4	136.0
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	19	135.9
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	19	135.9
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	18	135.8
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	5	135.8
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	5	135.8
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	8	135.7
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	8	135.7
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	19	135.7
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	3	135.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	3	135.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	11	135.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	11	135.6
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	10	135.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	13	135.5
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	13	135.5
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	16	135.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	3	135.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	3	135.3
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	17	135.2
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	17	135.2
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	12	134.9
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	16	134.9
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	4	134.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1	134.8
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1	134.8
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	20	134.8
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	8	134.8
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	8	134.8
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	16	134.7
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	14	134.7
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	14	134.7
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	2	134.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	2	134.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	20	134.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	20	134.6
(1,36)	1:A:34:VAL:C	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	9	134.6
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	7	134.6
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	15	134.5
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	15	134.5
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	2	134.5
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	2	134.5
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	18	134.3
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	18	134.3
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	15	134.3
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	15	134.3
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1	134.2
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	11	134.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	13	134.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	14	134.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	9	134.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	9	134.2
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	6	134.2
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	8	134.2
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	7	134.1
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	10	134.0
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	10	134.0
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	18	133.9
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	3	133.9
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	3	133.9
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	1	133.8
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	1	133.8
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	14	133.8
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	19	133.7
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	19	133.7
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	14	133.5
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1	133.5
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	12	133.3
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	12	133.3
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	7	133.1
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	7	133.1
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	9	133.0
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	11	133.0
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	11	133.0
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	6	132.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	6	132.7
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	18	132.7
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	18	132.7
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	15	132.6
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	15	132.6
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	2	132.4
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	8	132.4
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	8	132.4
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	3	132.3
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	3	132.3
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	5	132.3
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	5	132.3
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	6	132.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	10	132.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	10	132.2
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	15	132.2
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	18	132.2
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	6	132.1
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	10	132.1
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	4	132.1
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	14	132.0
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	20	132.0
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	20	132.0
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	2	132.0
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	9	132.0
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	15	132.0
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	5	131.9
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	5	131.9
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	11	131.9
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	11	131.9
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	17	131.9
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	5	131.8
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	19	131.7
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	12	131.7
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	20	131.7
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	20	131.7
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	10	131.7
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	10	131.7
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	15	131.7
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	15	131.7
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	8	131.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	12	131.6
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	12	131.6
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	3	131.5
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	13	131.5
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	3	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	3	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	6	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	6	131.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	8	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	8	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	19	131.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	19	131.4
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	17	131.3
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	17	131.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	2	131.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	2	131.2
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	20	131.2
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	20	131.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	7	131.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	7	131.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	15	131.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	15	131.2
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	13	131.2
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	13	131.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	12	131.1
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	12	131.1
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	13	131.1
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	13	131.1
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	19	131.1
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	19	131.1
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	16	131.0
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	16	131.0
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1	131.0
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1	131.0
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	18	131.0
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	18	131.0
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	15	131.0
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	4	131.0
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	10	130.9
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	10	130.9
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	4	130.8
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	4	130.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	8	130.8
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	10	130.7
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	10	130.7
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	4	130.7
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	4	130.7
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	17	130.7
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	17	130.6
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	17	130.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	15	130.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	15	130.6
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	9	130.6
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	12	130.6
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	7	130.5
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	7	130.5
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	7	130.5
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	11	130.5
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	15	130.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	15	130.5
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	12	130.4
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	17	130.4
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	17	130.4
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	17	130.4
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	19	130.3
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	5	130.3
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	5	130.3
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	17	130.2
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	17	130.2
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	20	130.2
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	2	130.1
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	2	130.1
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	8	130.0
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	14	130.0
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	14	130.0
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	6	130.0
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	6	130.0
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	19	129.9
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	20	129.9
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	20	129.9
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	18	129.9
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1	129.8
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1	129.8
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	15	129.8
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	4	129.8
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	2	129.8
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	2	129.8
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	3	129.8
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	3	129.8
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	9	129.7
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	9	129.7
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	9	129.7
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	16	129.7
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	16	129.7
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	19	129.7
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	10	129.6
(1,61)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	10	129.6
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1	129.6
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	9	129.6
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	13	129.4
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	13	129.4
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	6	129.4
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	6	129.4
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	2	129.4
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	20	129.4
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	12	129.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	12	129.3
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	10	129.3
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	10	129.3
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	5	129.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	5	129.3
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	20	129.3
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	8	129.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	8	129.2
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	14	129.2
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	9	129.1
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	11	129.1
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	11	129.1
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	8	129.1
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	15	129.1
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	3	129.0
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	7	128.9
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	7	128.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	17	128.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	17	128.9
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	7	128.9
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	7	128.9
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	9	128.9
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	9	128.9
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	7	128.8
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	7	128.8
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	14	128.8
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	14	128.8
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	9	128.7
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	9	128.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	5	128.6
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	5	128.6
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	7	128.6
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	4	128.5
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	4	128.5
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	5	128.5
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	5	128.5
(1,108)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	19	128.5
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	2	128.4
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	2	128.4
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	3	128.4
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	6	128.3
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	9	128.2
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	9	128.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	8	128.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	8	128.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	11	128.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	11	128.2
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	17	128.1
(1,65)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	17	128.1
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	17	128.1
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	17	128.1
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	4	128.0
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	4	128.0
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	12	128.0
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	12	128.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	17	127.9
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	17	127.9
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	16	127.9
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	9	127.9
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	7	127.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	7	127.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	18	127.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	18	127.7
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	16	127.7
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	17	127.6
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	20	127.4
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	2	127.3
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	10	127.3
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	7	127.3
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	7	127.3
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	10	127.3
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	10	127.3
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	7	127.1
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	7	127.1
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	15	127.1
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	15	127.1
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	12	127.0
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	14	127.0
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	14	127.0
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	6	127.0
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	6	127.0
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	13	127.0
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	18	127.0
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	5	126.9
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	10	126.9
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	10	126.9
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	14	126.7
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	6	126.7
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	8	126.7
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	8	126.7
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	10	126.6
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	12	126.6
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	12	126.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	11	126.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	11	126.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	19	126.5
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	19	126.5
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1	126.5
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	11	126.5
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	7	126.4
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	7	126.4
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	11	126.4
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1	126.3
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1	126.3
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	13	126.3
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	19	126.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	19	126.3
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	11	126.3
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	14	126.2
(1,30)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	14	126.2
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	6	126.2
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	16	126.0
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	14	126.0
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	4	125.9
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	8	125.8
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	8	125.8
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	9	125.8
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	4	125.7
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	4	125.7
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	17	125.7
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	17	125.7
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	16	125.6
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	17	125.6
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	4	125.5
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	4	125.5
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	18	125.5
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1	125.5
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	5	125.5
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	7	125.5
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	9	125.5
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	14	125.5
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1	125.5
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	8	125.4
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	2	125.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	9	125.4
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	12	125.4
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	11	125.3
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	5	125.3
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	11	125.3
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	14	125.3
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	14	125.3
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	8	125.3
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	5	125.2
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	14	125.2
(1,28)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	14	125.2
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	17	125.2
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	5	125.2
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	5	125.2
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	18	125.2
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	18	125.2
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	14	125.2
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	20	125.2
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	2	125.2
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	13	125.1
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	5	125.1
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	5	125.1
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	15	125.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	13	125.0
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	19	125.0
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	19	125.0
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	20	124.9
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	3	124.8
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	3	124.8
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	17	124.8
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	13	124.7
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	7	124.7
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	7	124.7
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	2	124.7
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	3	124.7
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	7	124.7
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	15	124.6
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	15	124.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	17	124.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	17	124.6
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	7	124.6
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	10	124.5
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	10	124.5
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	16	124.5
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	16	124.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	3	124.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	3	124.5
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	12	124.5
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	12	124.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1	124.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1	124.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1	124.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	11	124.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	13	124.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	19	124.4
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	6	124.3
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	6	124.3
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	16	124.3
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	16	124.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	3	124.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	3	124.2
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	6	124.2
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	16	124.1
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	16	124.1
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	12	124.1
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	2	124.0
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	2	124.0
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	13	124.0
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	13	124.0
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	4	124.0
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	6	124.0
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	10	123.9
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	10	123.9
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	13	123.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	13	123.9
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	19	123.8
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	19	123.8
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	11	123.8
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	11	123.8
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	5	123.8
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	9	123.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	9	123.7
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	8	123.7
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	8	123.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1	123.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1	123.7
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	3	123.6
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	3	123.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	16	123.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	16	123.6
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	8	123.6
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	16	123.4
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	15	123.4
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	15	123.4
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	12	123.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	5	123.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	8	123.4
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	8	123.3
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	8	123.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	16	123.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	16	123.2
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	6	123.2
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	6	123.2
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	123.2
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	123.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	20	123.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	20	123.2
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	16	123.2
(1,58)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	16	123.2
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	9	123.2
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	9	123.2
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	2	123.2
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	4	123.2
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	17	123.2
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	13	123.2
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	20	123.1
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	20	123.1
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	11	123.0
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	11	123.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	2	123.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	2	123.0
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	4	123.0
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	4	123.0
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	5	122.9
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	5	122.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	13	122.9
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	13	122.9
(1,99)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	14	122.8
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1	122.8
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	5	122.8
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	10	122.7
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	8	122.7
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	8	122.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	7	122.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	7	122.7
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	5	122.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	10	122.6
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	10	122.6
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	16	122.6
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	4	122.6
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	9	122.6
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	9	122.6
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	10	122.6
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	10	122.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	14	122.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	14	122.6
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	12	122.5
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	12	122.5
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	4	122.4
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	4	122.4
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	17	122.4
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	10	122.4
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	10	122.4
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	12	122.4
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	12	122.4
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	14	122.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	14	122.3
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	13	122.3
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	2	122.3
(1,107)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	12	122.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	7	122.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	7	122.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	17	122.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	17	122.2
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	8	122.2
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	8	122.2
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	17	122.2
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	7	122.2
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	11	122.2
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	15	122.2
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	2	122.2
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	5	122.1
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	5	122.1
(1,6)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	6	122.0
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	8	122.0
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	20	122.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	7	122.0
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	20	121.9
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	20	121.9
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	3	121.9
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	3	121.9
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	2	121.9
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	2	121.9
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	3	121.8
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	3	121.8
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	6	121.8
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	6	121.8
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	17	121.8
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	18	121.8
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	18	121.7
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	18	121.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	3	121.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	3	121.7
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	7	121.6
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	18	121.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	12	121.5
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	12	121.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	10	121.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	10	121.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	11	121.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	11	121.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	15	121.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	15	121.5
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1	121.5
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1	121.5
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	15	121.4
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	15	121.4
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	9	121.4
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	9	121.4
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1	121.4
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	12	121.3
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	12	121.3
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	2	121.3
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	2	121.3
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	3	121.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	15	121.2
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	15	121.2
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	12	121.2
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	12	121.2
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	9	121.2
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	16	121.1
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	16	121.1
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	20	121.1
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	20	121.1
(1,101)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	10	121.0
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	3	120.9
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	9	120.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	9	120.8
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	14	120.8
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	14	120.8
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	17	120.8
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	17	120.8
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	8	120.7
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	19	120.7
(1,14)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	19	120.7
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	13	120.6
(1,71)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	13	120.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	14	120.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	14	120.6
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	16	120.5
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	2	120.4
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	2	120.4
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	12	120.4
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	3	120.3
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	3	120.3
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	6	120.3
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	6	120.3
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	18	120.3
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	18	120.3
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	14	120.2
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	17	120.2
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	17	120.2
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	4	120.2
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	4	120.2
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	1	120.2
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	6	120.1
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	10	120.1
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	17	120.0
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	6	120.0
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	6	120.0
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1	120.0
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1	120.0
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	2	120.0
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	2	120.0
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	20	120.0
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	11	119.9
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	11	119.9
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	3	119.9
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	20	119.8
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	20	119.8
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	7	119.8
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	7	119.8
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	20	119.8
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	20	119.8
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	17	119.8
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	17	119.8
(1,106)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	10	119.8
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	3	119.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	3	119.7
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	12	119.6
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	11	119.6
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	19	119.6
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	19	119.6
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	13	119.5
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	13	119.5
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	16	119.5
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	16	119.5
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	12	119.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	5	119.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	5	119.5
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	16	119.5
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	11	119.3
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	11	119.3
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	4	119.3
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	5	119.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	5	119.2
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	18	119.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	13	119.0
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	13	119.0
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	10	119.0
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	12	119.0
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	19	119.0
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	15	118.9
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	15	118.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	20	118.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	20	118.9
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	6	118.8
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	13	118.8
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	13	118.8
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	7	118.7
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	5	118.6
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	5	118.6
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	10	118.6
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	18	118.6
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	3	118.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	3	118.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	7	118.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	7	118.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	16	118.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	16	118.5
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	5	118.4
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	15	118.3
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	3	118.2
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	11	118.2
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	8	118.1
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	8	118.1
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	16	118.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	16	118.0
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	10	118.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	10	118.0
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	7	117.8
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	4	117.7
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	4	117.7
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	5	117.7
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	17	117.6
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	17	117.6
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	13	117.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	3	117.6
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	3	117.6
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	14	117.5
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	14	117.5
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	17	117.4
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	17	117.4
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	19	117.4
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	19	117.4
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	5	117.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	13	117.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	13	117.4
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	8	117.3
(1,9)	1:A:13:ASN:C	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	8	117.3
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	6	117.3
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	4	117.3
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	4	117.3
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	19	117.3
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	18	117.2
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	18	117.2
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	9	117.2
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	9	117.2
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	2	117.1
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	2	117.1
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	11	117.1
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	6	117.1
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	6	117.1
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	15	117.0
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	15	117.0
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	17	116.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	8	116.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	8	116.9
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	20	116.8
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1	116.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1	116.6
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	9	116.6
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	17	116.6
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	17	116.6
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	9	116.5
(1,69)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	9	116.5
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	10	116.5
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	5	116.5
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	5	116.5
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	18	116.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	18	116.4
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	20	116.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	6	116.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	6	116.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	12	116.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	12	116.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	5	116.3
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	5	116.3
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	16	116.3
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	5	116.2
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	5	116.2
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	12	116.2
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	12	116.2
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	20	116.2
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	20	116.2
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	6	116.2
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	18	116.2
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	12	116.1
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	12	116.1
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	19	116.1
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	13	116.0
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	13	116.0
(1,31)	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	20	115.9
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	19	115.9
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	19	115.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	7	115.9
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	7	115.9
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	18	115.8
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	15	115.8
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	15	115.8
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	4	115.7
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	4	115.7
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	3	115.7
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	3	115.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	12	115.7
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	12	115.7
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	2	115.6
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	19	115.5
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	19	115.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	5	115.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	5	115.5
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	9	115.5
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	5	115.5
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	5	115.5
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	2	115.3
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	16	115.3
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	16	115.3
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	20	115.3
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	4	115.1
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1	115.1
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1	115.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	10	114.9
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	10	114.9
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	12	114.9
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	11	114.8
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	11	114.8
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	8	114.6
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	17	114.6
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	17	114.6
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	19	114.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	19	114.5
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1	114.5
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	2	114.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	2	114.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	18	114.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	18	114.4
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	14	114.2
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	18	114.1
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	18	114.1
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	19	114.0
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	19	114.0
(1,100)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	2	114.0
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	8	113.8
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1	113.8
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1	113.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	15	113.7
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	19	113.7
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	19	113.7
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	7	113.6
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	7	113.6
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	11	113.6
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	11	113.6
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	11	113.6
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	17	113.6
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	14	113.5
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	4	113.4
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	2	113.3
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	2	113.3
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	15	113.2
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1	113.1
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1	113.1
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	3	113.1
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	3	113.1
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	10	113.0
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	10	113.0
(1,60)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	10	113.0
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	9	113.0
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	9	113.0
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	12	112.8
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	12	112.8
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1	112.8
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1	112.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	14	112.7
(1,73)	1:A:69:ALA:C	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	14	112.7
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	4	112.7
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	4	112.7
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	4	112.7
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	6	112.7
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	14	112.7
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1	112.6
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1	112.6
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	18	112.6
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	18	112.6
(1,33)	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	1:A:32:THR:CA	1:A:32:THR:C	15	112.6
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	20	112.6
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	20	112.6
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	14	112.6
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	14	112.6
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	9	112.5
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	9	112.5
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	3	112.4
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	20	112.4
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	20	112.4
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	9	112.4
(1,56)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	9	112.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	8	112.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	8	112.4
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	20	112.4
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	20	112.4
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	7	112.3
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	6	112.2
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	5	112.1
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	12	112.1
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	12	112.1
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	18	112.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	18	112.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	19	112.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	19	112.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	20	111.9
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	20	111.9
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	1	111.8
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	18	111.7
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	18	111.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	15	111.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	15	111.6
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	10	111.6
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	10	111.6
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	16	111.6
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	16	111.6
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	17	111.6
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	10	111.4
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	10	111.4
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	13	111.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	3	111.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	3	111.4
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	20	111.3
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	20	111.3
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	15	111.3
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	4	111.3
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	16	111.1
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	16	111.1
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	16	111.1
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	14	111.1
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	14	111.1
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	7	110.9
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	4	110.9
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	4	110.9
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	15	110.8
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	11	110.8
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	14	110.7
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	14	110.7
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	1	110.7
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	9	110.7
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	16	110.7
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	16	110.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	17	110.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	17	110.6
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	19	110.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	9	110.4
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	9	110.4
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	2	110.4
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	2	110.4
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1	110.2
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1	110.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	9	110.2
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1	110.2
(1,11)	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1	110.2
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	9	110.1
(1,55)	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	9	110.1
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	13	110.1
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	13	110.1
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	18	110.0
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	11	110.0
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	11	110.0
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	13	109.9
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	13	109.9
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	7	109.9
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	7	109.9
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	5	109.8
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	5	109.8
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	12	109.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	12	109.7
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	2	109.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	6	109.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	6	109.5
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	7	109.5
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	7	109.5
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	12	109.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	15	109.4
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	15	109.4
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	2	109.2
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	9	109.2
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	20	109.1
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	6	109.0
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	6	109.0
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	18	108.8
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	18	108.8
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	16	108.8
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	16	108.8
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	3	108.7
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	3	108.7
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	11	108.6
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	11	108.6
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	9	108.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	6	108.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	6	108.6
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	7	108.4
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	14	108.4
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	14	108.3
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	14	108.3
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1	108.2
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	14	108.2
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	14	108.2
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	6	108.2
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	6	108.2
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	8	108.1
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	8	108.1
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	17	108.1
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	8	108.0
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	8	108.0
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	9	107.9
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	9	107.9
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	8	107.9
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	8	107.9
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	12	107.9
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	16	107.8
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	16	107.8
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	3	107.8
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	12	107.7
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	12	107.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	7	107.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	7	107.7
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	12	107.7
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	12	107.7
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	6	107.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	18	107.6
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	5	107.6
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	7	107.5
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	7	107.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	13	107.5
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	13	107.5
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	7	107.5
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	10	107.4
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	8	107.3
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	16	107.2
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	16	107.2
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	17	107.2
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	17	107.2
(1,63)	1:A:58:MET:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	3	107.1
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	6	107.1
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	6	107.1
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	14	107.1
(1,29)	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	14	107.1
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	5	107.0
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	5	107.0
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	4	107.0
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	3	106.9
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1	106.9
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1	106.9
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	4	106.9
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	4	106.9
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	14	106.9
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	14	106.8
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	18	106.8
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	19	106.8
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	18	106.8
(1,64)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	18	106.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	12	106.7
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	13	106.7
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	16	106.6
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	16	106.6
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	5	106.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	17	106.4
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	17	106.4
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	19	106.3
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	19	106.3
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	19	106.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	19	106.2
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	6	106.1
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	2	106.0
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	2	106.0
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	18	106.0
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	18	106.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	8	106.0
(1,57)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	8	106.0
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	7	106.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	19	105.9
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	19	105.9
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	5	105.8
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	5	105.8
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	15	105.8
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	11	105.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	11	105.7
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	13	105.7
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	13	105.7
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	15	105.7
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	15	105.7
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	11	105.7
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	11	105.7
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	13	105.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	18	105.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	18	105.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	19	105.5
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	19	105.5
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	4	105.5
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	4	105.5
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	10	105.5
(1,102)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	3	105.5
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	15	105.3
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	15	105.3
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	17	105.2
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	17	105.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	19	105.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	11	105.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	11	105.2
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	14	105.1
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	14	105.1
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	12	105.1
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	12	105.1
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	13	105.0
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	11	104.9
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	11	104.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	8	104.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	8	104.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	16	104.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	16	104.9
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	4	104.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	4	104.7
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	20	104.6
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	20	104.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	3	104.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	3	104.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	20	104.5
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	20	104.5
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	3	104.5
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	4	104.4
(1,16)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	4	104.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,67)	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	16	104.2
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	15	104.0
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	15	103.8
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	9	103.8
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	9	103.8
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	2	103.7
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	2	103.7
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	2	103.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	2	103.6
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	7	103.6
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	20	103.3
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	4	103.2
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1	103.2
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1	103.2
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	13	103.0
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	10	103.0
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	10	103.0
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	10	102.9
(1,15)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	10	102.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	17	102.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	17	102.9
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	12	102.9
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	11	102.8
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	11	102.8
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	11	102.8
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	9	102.8
(1,34)	1:A:32:THR:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	16	102.7
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	18	102.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1	102.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1	102.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	5	102.6
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	5	102.6
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	18	102.5
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	12	102.4
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1	102.3
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1	102.3
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	8	102.3
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	5	102.3
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	8	102.3
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	12	102.3
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	15	102.3
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1	102.2
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	11	102.2
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	12	102.2
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	19	102.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	17	102.2
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	12	102.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	14	102.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	14	102.2
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	2	102.1
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	12	102.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	12	102.1
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	2	102.0
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	2	102.0
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	9	101.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	7	101.9
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	7	101.9
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	13	101.8
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	13	101.8
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	4	101.8
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	17	101.8
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	20	101.7
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	20	101.7
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	2	101.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	16	101.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	16	101.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	14	101.5
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	14	101.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	13	101.5
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	13	101.5
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	16	101.5
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	9	101.3
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	9	101.3
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	15	101.2
(1,32)	1:A:31:TYR:N	1:A:31:TYR:CA	1:A:31:TYR:C	1:A:32:THR:N	19	101.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	2	101.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	2	101.2
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	13	100.7
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	5	100.5
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	3	100.5
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	2	100.3
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	13	100.2
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	16	100.2
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	7	100.0
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	10	100.0
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	4	100.0
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	4	100.0
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	7	99.7
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	1	99.6
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	16	99.2
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	18	99.2
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	18	99.2
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	18	99.1
(1,4)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	18	99.1
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	9	99.0
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	9	99.0
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	12	99.0
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	20	98.9
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	1	98.7
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	5	98.6
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	13	98.3
(1,68)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	13	98.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	2	98.3
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	2	98.3
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	14	98.2
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	11	98.1
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	20	98.0
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	12	97.9
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	9	97.9
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	10	97.6
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1	97.6
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	2	97.5
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	19	97.5
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	2	97.5
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	7	97.5
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	7	97.5
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	14	97.4
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	2	97.3
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	19	97.3
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	13	97.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	18	97.2
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	14	97.2
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	8	97.2
(1,18)	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:C	19	97.1
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	97.0
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	97.0
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	9	96.9
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	20	96.9
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	3	96.8
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1	96.7
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	6	96.7
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	3	96.6
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	9	96.5
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	4	96.5
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	5	96.5
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	5	96.5
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	5	96.4
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	9	96.3
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	9	96.3
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	17	96.3
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	5	96.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	10	96.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	10	96.3
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	17	96.2
(1,59)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	17	96.2
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	8	96.2
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	8	96.1
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	17	96.0
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	3	96.0
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	14	96.0
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	14	96.0
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	3	95.7
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	18	95.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	11	94.9
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	14	94.9
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	3	94.6
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	18	94.6
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	13	94.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	13	94.2
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	7	94.1
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	20	94.1
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	15	93.9
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1	93.9
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	13	93.8
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	20	93.7
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	16	93.7
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	15	93.6
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	14	93.6
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	4	93.4
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	3	93.4
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	19	93.3
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	18	93.2
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	13	92.8
(1,13)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	13	92.8
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	2	92.6
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	6	92.5
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	16	92.4
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	14	92.3
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	18	92.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	12	92.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	12	92.3
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	4	92.2
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	5	92.2
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	7	92.2
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	10	92.2
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	11	92.2
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	20	92.2
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	16	92.1
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	15	92.0
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	4	92.0
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	13	92.0
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	17	91.9
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	17	91.9
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	17	91.8
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	9	91.8
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	9	91.8
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	12	91.8
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	8	91.7
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	8	91.7
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	8	91.6
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	10	91.5
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	11	91.4
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	6	91.4
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	19	91.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	9	91.0
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	11	90.7
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	1	90.7
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	8	90.6
(1,2)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CA	1:A:4:ILE:C	20	90.5
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	17	90.4
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	10	90.2
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	15	90.2
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	15	90.2
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	20	90.0
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	6	90.0
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	17	90.0
(1,52)	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	3	89.8
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	8	89.8
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	3	89.5
(1,66)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	17	89.3
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	10	89.2
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	18	89.1
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	4	88.8
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1	88.4
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	18	88.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	18	88.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	6	88.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	6	88.3
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	16	88.1
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	7	87.8
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	16	87.7
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	16	87.7
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	19	87.6
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	6	87.5
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	6	87.4
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	14	87.3
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	10	87.3
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	19	87.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	4	87.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	4	87.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	11	87.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	11	87.2
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	2	87.2
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	9	87.2
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	16	87.2
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	11	87.1
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	8	86.9
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	19	86.9
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	3	86.9
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	17	86.7
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	17	86.7
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	8	86.7
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	8	86.7
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	15	86.7
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1	86.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	19	86.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	7	86.2
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	7	86.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	3	85.8
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	3	85.8
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	4	85.7
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	4	85.7
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	18	85.7
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	18	85.7
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	4	85.6
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	6	85.6
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	6	85.6
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	17	85.5
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	16	85.5
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	16	85.5
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	14	85.4
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	14	85.4
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	16	85.4
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	16	85.4
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	7	85.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	7	85.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	20	85.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	20	85.3
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	6	85.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	3	85.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	3	85.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	3	84.7
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	3	84.7
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1	84.6
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1	84.6
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	10	84.6
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	10	84.6
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	15	84.4
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	15	84.4
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	9	84.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	9	84.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	13	84.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	13	84.3
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	13	84.2
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	1	84.2
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	8	84.0
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	8	84.0
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	18	83.8
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	12	83.8
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	12	83.8
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	20	83.8
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	20	83.8
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	1	83.7
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	20	83.5
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1	83.5
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1	83.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	14	83.4
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	12	83.3
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	20	83.2
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	19	83.2
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	19	83.2
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	19	83.1
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	5	83.1
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	20	83.1
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	13	83.0
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	3	82.4
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	7	82.2
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	18	82.1
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	17	82.1
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	12	82.0
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	13	82.0
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	10	81.9
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	17	81.9
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	17	81.9
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	19	81.9
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	81.8
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	81.8
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	16	81.7
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	8	81.7
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	14	81.7
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	2	81.7
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	2	81.7
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	5	81.6
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	8	81.6
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	18	81.5
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	2	81.5
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	18	81.5
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	20	81.5
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	18	81.4
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	11	81.4
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	3	81.4
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	3	81.3
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	2	80.8
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	2	80.8
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	10	80.7
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	10	80.7
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	19	80.6
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	19	80.5
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	19	80.5
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	20	80.5
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	5	80.5
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	7	80.3
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	4	80.2
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	11	80.0
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	11	80.0
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	17	80.0
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	17	80.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	6	79.9
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	5	79.8
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	12	79.8
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	20	79.5
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	5	79.5
(1,78)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	5	79.5
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	11	79.5
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	13	79.4
(1,7)	1:A:10:PRO:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	10	79.3
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	6	79.2
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	18	79.1
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	18	79.1
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	20	78.9
(1,103)	1:A:37:SER:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	4	78.9
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	11	78.7
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	13	78.7
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	15	78.6
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	13	78.2
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	13	78.2
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	7	77.8
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	15	77.8
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	16	77.6
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	14	77.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	14	77.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	15	77.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	15	77.3
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	2	77.3
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	8	77.3
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	19	77.2
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	4	77.2
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	5	77.1
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	8	77.1
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	15	77.0
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	13	77.0
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	4	76.9
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	9	76.7
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	3	76.4
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	20	76.4
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	10	76.3
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	18	76.3
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	7	76.1
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	19	76.1
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	19	76.1
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	15	76.0
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	9	76.0
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	11	75.9
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	6	75.8
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	19	75.6
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	4	75.6
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	4	75.6
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	10	75.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	5	75.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	18	75.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	18	75.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	11	75.3
(1,17)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	11	75.3
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	6	75.2
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	9	75.2
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	18	75.2
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	13	75.0
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1	74.8
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	2	74.5
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	11	74.4
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	15	74.4
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	12	74.3
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	9	74.1
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	8	74.0
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	2	74.0
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	6	73.9
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	12	73.9
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	2	73.8
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	3	73.8
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	9	73.7
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	9	73.7
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1	73.6
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	10	73.6
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1	73.6
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	14	73.5
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	18	73.4
(1,24)	1:A:25:GLY:C	1:A:26:MET:N	1:A:26:MET:CA	1:A:26:MET:C	2	73.3
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	7	73.1
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	20	73.1
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	15	73.0
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	4	72.8
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1	72.8
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	16	72.6
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	16	72.5
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	16	72.5
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	2	72.4
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	2	72.4
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	6	72.4
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	6	72.4
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	13	72.4
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	13	72.4
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	11	72.4
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	1	72.3
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	11	72.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	7	72.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	7	72.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	6	72.2
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	6	72.2
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	10	72.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	4	72.1
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	4	72.1
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	5	72.1
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	5	72.1
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	19	72.1
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	4	72.0
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	8	72.0
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	3	72.0
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	12	71.9
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	12	71.9
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	18	71.9
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	18	71.9
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	16	71.9
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	2	71.8
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	16	71.8
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	12	71.7
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	20	71.7
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	20	71.7
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1	71.6
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	14	71.6
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	17	71.6
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	15	71.6
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	5	71.5
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	11	71.5
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	11	71.5
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	18	71.4
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	18	71.4
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	16	71.4
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	5	71.2
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	6	71.2
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	16	71.2
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	3	71.1
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	5	71.1
(1,47)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	10	71.0
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	8	70.9
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	11	70.9
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	17	70.8
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	12	70.8
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	19	70.8
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	19	70.8
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	19	70.6
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	19	70.6
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	13	70.6
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	17	70.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	15	70.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	15	70.5
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	4	70.4
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	4	70.4
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	4	70.4
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	12	70.3
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	2	70.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	2	70.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	11	70.1
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	11	70.1
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	10	69.8
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	14	69.7
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	13	69.6
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	13	69.6
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	6	69.5
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	17	69.4
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	17	69.4
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	9	69.4
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	9	69.4
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	6	69.4
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	9	69.3
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	7	69.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	12	69.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	12	69.3
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	20	69.2
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	20	69.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	5	69.1
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	5	69.1
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	3	69.1
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	3	69.1
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	13	69.1
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	18	68.9
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	18	68.9
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	9	68.9
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	14	68.8
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	14	68.8
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	18	68.7
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	8	68.7
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	8	68.7
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	20	68.7
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	20	68.7
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	9	68.6
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	9	68.6
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	10	68.6
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	10	68.6
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	16	68.6
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	20	68.6
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	6	68.4
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	6	68.4
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	15	68.4
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	15	68.4
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1	68.4
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	8	68.4
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	11	68.4
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	2	68.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	2	68.3
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	2	68.3
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	15	68.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	2	68.3
(1,21)	1:A:21:GLU:C	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	2	68.3
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	3	68.3
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	17	68.3
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	12	68.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	12	68.2
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	12	68.2
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	12	68.2
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	3	68.2
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	5	68.2
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	6	68.2
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	10	68.2
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	14	68.2
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	6	68.0
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	6	68.0
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	20	68.0
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	20	68.0
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	3	67.9
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	3	67.9
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	16	67.9
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	19	67.8
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	12	67.7
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	14	67.7
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	15	67.7
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	14	67.6
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	13	67.5
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	13	67.5
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	13	67.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	17	67.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	17	67.5
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	9	67.4
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	9	67.4
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	9	67.4
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	20	67.4
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	20	67.4
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	7	67.4
(1,20)	1:A:20:SER:C	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	20	67.4
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	5	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	5	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	7	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	7	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	8	67.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	8	67.3
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	12	67.3
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	2	67.2
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	4	67.2
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	6	67.2
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	7	67.2
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	16	67.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	20	67.2
(1,111)	1:A:65:LYS:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	14	67.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	8	67.1
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	8	67.1
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	10	67.1
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	10	67.1
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	15	67.1
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	15	67.1
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	9	67.1
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	5	67.1
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	18	67.1
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	16	67.0
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	16	67.0
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	7	67.0
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	14	67.0
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	14	66.9
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	14	66.9
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	17	66.9
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	1	66.9
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	15	66.9
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	5	66.9
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	7	66.9
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	13	66.8
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	20	66.8
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	20	66.8
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	9	66.8
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	3	66.7
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	3	66.7
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	18	66.7
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	18	66.7
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	15	66.7
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	15	66.7
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	19	66.6
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	19	66.6
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	4	66.6
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	11	66.6
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	10	66.4
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	20	66.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1	66.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1	66.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	20	66.2
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	20	66.2
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	3	66.2
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	11	66.1
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	4	66.0
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	4	66.0
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	8	65.9
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	15	65.8
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	15	65.8
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	4	65.8
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	4	65.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	7	65.8
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	7	65.7
(1,84)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	7	65.7
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	19	65.7
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	9	65.7
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	15	65.7
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	11	65.6
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	11	65.6
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	19	65.6
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	12	65.5
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	10	65.4
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	10	65.4
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1	65.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1	65.3
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1	65.3
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	17	65.1
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	17	65.1
(1,74)	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	17	65.1
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	7	65.1
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	2	64.9
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	18	64.9
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	15	64.9
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	15	64.9
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	16	64.8
(1,80)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	16	64.8
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	13	64.5
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	13	64.5
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1	64.5
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	17	64.4
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	14	64.4
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	14	64.4
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	17	64.4
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	17	64.4
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	17	64.4
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	8	64.2
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	19	64.2
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	8	64.2
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	16	64.1
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	16	64.1
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	8	64.0
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	8	64.0
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	3	63.7
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	3	63.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	7	63.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	7	63.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	20	63.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	20	63.7
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	20	63.6
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	20	63.6
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1	63.6
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1	63.6
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	3	63.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	3	63.5
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	6	63.3
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	6	63.3
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	4	63.3
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	4	63.3
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	13	63.3
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	12	63.3
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	19	63.2
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	5	63.2
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	5	63.2
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	19	63.2
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	19	63.2
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1	63.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1	63.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	9	63.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	9	63.1
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	17	63.1
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	9	63.0
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	9	63.0
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	5	63.0
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	16	63.0
(1,115)	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	13	63.0
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	20	63.0
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	17	63.0
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	6	62.9
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	6	62.9
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	16	62.9
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	16	62.9
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	10	62.9
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	6	62.8
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	6	62.8
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	18	62.8
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	18	62.8
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	6	62.8
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	6	62.8
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	8	62.8
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	2	62.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	2	62.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	15	62.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	15	62.7
(1,120)	1:A:85:GLU:C	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	18	62.7
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	12	62.5
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	12	62.5
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	10	62.5
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	10	62.5
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	6	62.5
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	20	62.4
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	13	62.3
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	13	62.3
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	12	62.3
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	12	62.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	4	62.3
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	5	62.2
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1	62.2
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	16	62.2
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	4	62.1
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	13	62.1
(1,8)	1:A:12:HIS:C	1:A:13:ASN:N	1:A:13:ASN:CA	1:A:13:ASN:C	15	62.1
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	17	62.1
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	17	62.1
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	8	62.1
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	11	62.1
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	7	62.0
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	6	62.0
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	9	62.0
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	16	62.0
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	16	62.0
(1,26)	1:A:27:THR:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	2	62.0
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	12	62.0
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	11	61.9
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	17	61.9
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	17	61.9
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	3	61.9
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	3	61.9
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	3	61.9
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	10	61.9
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	15	61.9
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	15	61.9
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	18	61.9
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	18	61.9
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	3	61.9
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	9	61.8
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	9	61.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	9	61.7
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	12	61.7
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	15	61.7
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	5	61.6
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	5	61.6
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	7	61.6
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	15	61.5
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	15	61.5
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	19	61.5
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	14	61.4
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	14	61.4
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	5	61.3
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	5	61.3
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	10	61.3
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	10	61.3
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	5	61.3
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	19	61.3
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	8	61.2
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	8	61.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	15	61.2
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	19	61.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	6	61.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	6	61.1
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	5	61.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	14	61.0
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	14	61.0
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	2	61.0
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	2	61.0
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	7	60.9
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	2	60.9
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	16	60.8
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	16	60.8
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	8	60.7
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	8	60.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	11	60.7
(1,39)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	11	60.7
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	2	60.6
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	14	60.6
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	17	60.6
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	17	60.6
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	17	60.6
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	17	60.6
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	11	60.5
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	11	60.5
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	10	60.5
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	10	60.5
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	9	60.5
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	15	60.5
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	8	60.4
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	2	60.3
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	2	60.3
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	12	60.3
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	12	60.3
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1	60.3
(1,1)	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	9	60.3
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	3	60.2
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	3	60.2
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	14	60.1
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	6	60.1
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	13	60.1
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	18	60.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	8	60.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	8	60.1
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	3	60.1
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	11	60.0
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	16	60.0
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	16	60.0
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	19	59.9
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	19	59.9
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	8	59.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	6	59.9
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	11	59.9
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	11	59.9
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	15	59.8
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	9	59.8
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	9	59.8
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	20	59.8
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	9	59.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	17	59.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	17	59.7
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	7	59.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	7	59.6
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	17	59.6
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	16	59.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	5	59.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	5	59.5
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	18	59.5
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1	59.4
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1	59.4
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	10	59.2
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	10	59.2
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	19	59.2
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	19	59.2
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	4	59.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	4	59.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	17	59.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	17	59.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	3	59.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	3	59.1
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	1	59.0
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	6	58.9
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	11	58.9
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	16	58.9
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	16	58.9
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	4	58.9
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	4	58.9
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	13	58.9
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	11	58.8
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	11	58.8
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	13	58.8
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	13	58.8
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	7	58.8
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	7	58.8
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	18	58.7
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	7	58.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	19	58.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	19	58.6
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	4	58.6
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	7	58.6
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	4	58.6
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	4	58.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	14	58.6
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	14	58.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	4	58.5
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	4	58.5
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	7	58.5
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	2	58.5
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	7	58.4
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	7	58.4
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	3	58.4
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	3	58.3
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	4	58.3
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	15	58.3
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	2	58.3
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	2	58.3
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	14	58.3
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	14	58.3
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	5	58.1
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	12	58.0
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	12	58.0
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	13	58.0
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	13	58.0
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	2	57.9
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	8	57.9
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	2	57.9
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	2	57.9
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	12	57.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	12	57.6
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	10	57.6
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	20	57.4
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	6	57.4
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	11	57.4
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	18	57.4
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	18	57.4
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	9	57.4
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	9	57.4
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	16	57.4
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	16	57.4
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	10	57.3
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	10	57.3
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	19	57.2
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	19	57.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	19	57.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	19	57.2
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	18	57.1
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	18	57.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	7	57.1
(1,82)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	7	57.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1	57.1
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1	57.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	7	56.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	7	56.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	19	56.9
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	19	56.9
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	11	56.9
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	2	56.8
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	10	56.7
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	12	56.7
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	12	56.7
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	19	56.7
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	19	56.7
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	9	56.6
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	12	56.6
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	19	56.6
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	14	56.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	14	56.5
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	14	56.5
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	14	56.5
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	20	56.5
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	5	56.5
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	5	56.5
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	5	56.4
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	13	56.4
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	13	56.4
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	13	56.4
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	11	56.3
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	11	56.3
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	16	56.3
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	12	56.3
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	16	56.3
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1	56.2
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	9	56.2
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	9	56.2
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	12	56.0
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	3	56.0
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	3	56.0
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1	56.0
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	2	55.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1	55.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1	55.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	5	55.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	5	55.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	10	55.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	10	55.9
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1	55.9
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1	55.9
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	4	55.9
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	4	55.9
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	4	55.9
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	4	55.9
(1,94)	1:A:82:PHE:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	4	55.8
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	17	55.8
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	17	55.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	2	55.8
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	2	55.8
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	13	55.8
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	13	55.8
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	18	55.8
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	18	55.8
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	14	55.8
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	18	55.7
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	18	55.7
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	19	55.7
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	19	55.7
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	11	55.7
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	11	55.7
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	11	55.7
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	11	55.7
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	9	55.7
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	9	55.7
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	2	55.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	2	55.6
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	13	55.6
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	13	55.6
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	5	55.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	14	55.5
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	14	55.5
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	10	55.5
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	2	55.5
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	2	55.5
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	8	55.4
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	8	55.4
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	2	55.4
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	2	55.4
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	11	55.4
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	11	55.4
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	13	55.3
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	13	55.3
(1,72)	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1:A:69:ALA:CA	1:A:69:ALA:C	18	55.3
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	5	55.3
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	5	55.3
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	8	55.3
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	8	55.3
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	16	55.3
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	8	55.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	8	55.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	10	55.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	10	55.2
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	2	55.2
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	2	55.2
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	7	55.2
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	7	55.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1	55.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1	55.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	8	55.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	8	55.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	20	55.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	20	55.1
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	16	55.1
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	17	55.1
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	15	55.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	4	55.0
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	4	55.0
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	12	55.0
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	12	55.0
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	6	55.0
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	6	55.0
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	12	55.0
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	12	55.0
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	7	55.0
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	7	55.0
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	10	55.0
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	10	55.0
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	4	55.0
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	4	55.0
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	18	55.0
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	17	54.9
(1,93)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	19	54.9
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	3	54.9
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	3	54.9
(1,113)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	14	54.8
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	2	54.7
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	2	54.7
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	3	54.7
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	3	54.7
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	14	54.7
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	14	54.7
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	16	54.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	16	54.6
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	13	54.6
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	13	54.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	3	54.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	3	54.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	10	54.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	10	54.6
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	18	54.6
(1,43)	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	18	54.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	14	54.5
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	14	54.5
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	6	54.5
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	6	54.5
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	11	54.4
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	11	54.4
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	7	54.4
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	7	54.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	14	54.4
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	14	54.4
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	15	54.4
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1	54.3
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1	54.3
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	10	54.3
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	10	54.3
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	18	54.3
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	18	54.3
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	4	54.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	4	54.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	5	54.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	5	54.2
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1	54.2
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1	54.2
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	4	54.1
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	4	54.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	17	54.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	17	54.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	19	54.1
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	19	54.1
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	16	54.1
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	16	54.1
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	7	54.1
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	19	54.0
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	15	54.0
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	15	54.0
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	15	53.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	15	53.9
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	19	53.9
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	19	53.9
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	15	53.9
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	15	53.9
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	6	53.8
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	6	53.8
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	5	53.7
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	6	53.7
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	3	53.7
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	3	53.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	5	53.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	5	53.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	20	53.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	20	53.7
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	3	53.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	3	53.6
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	7	53.6
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	7	53.6
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	20	53.5
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	20	53.5
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	19	53.5
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	19	53.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	9	53.4
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	9	53.4
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	13	53.4
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	13	53.4
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	14	53.4
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	9	53.4
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	9	53.4
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	11	53.4
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	1	53.3
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	13	53.3
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	8	53.3
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	8	53.3
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	15	53.2
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	16	53.2
(1,90)	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	16	53.2
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	5	53.2
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	5	53.2
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	20	53.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	15	53.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	15	53.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	11	53.1
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	11	53.1
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	12	53.1
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	12	53.1
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	18	53.1
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	18	53.1
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	14	53.0
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	17	53.0
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	17	53.0
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	2	52.9
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	2	52.9
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	9	52.9
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	9	52.9
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	8	52.9
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	8	52.9
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	15	52.8
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	15	52.8
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	9	52.8
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	17	52.8
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	2	52.8
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	2	52.8
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	15	52.7
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	14	52.6
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	14	52.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	8	52.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	8	52.6
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	20	52.6
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	20	52.6
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	20	52.6
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	15	52.5
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	15	52.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	6	52.5
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	6	52.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	3	52.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	3	52.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	7	52.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	7	52.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	14	52.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	14	52.5
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1	52.4
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1	52.4
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	18	52.3
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	13	52.3
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	13	52.3
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	17	52.3
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	17	52.3
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	19	52.3
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	19	52.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	8	52.2
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	8	52.2
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	15	52.2
(1,45)	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	15	52.2
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	10	52.1
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	10	52.1
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	10	52.1
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	10	52.1
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	6	52.0
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	6	52.0
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1	51.8
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1	51.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	4	51.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	4	51.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	7	51.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	7	51.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	16	51.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	16	51.8
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	5	51.8
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	5	51.8
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	9	51.8
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	9	51.7
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	9	51.7
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	8	51.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	8	51.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	16	51.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	16	51.6
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	13	51.6
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1	51.3
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1	51.3
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	51.3
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	51.3
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	16	51.3
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	6	51.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	6	51.2
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	3	51.2
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	3	51.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	12	51.2
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	12	51.2
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	16	51.1
(1,88)	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	16	51.1
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	12	51.1
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	12	51.1
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	6	51.1
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	6	51.1
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	17	51.1
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	4	51.0
(1,76)	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	4	51.0
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	11	51.0
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	11	51.0
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	13	51.0
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	13	51.0
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	18	50.9
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	18	50.7
(1,41)	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	18	50.7
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	6	50.6
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	6	50.6
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	10	50.6
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	9	50.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	7	50.4
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	7	50.4
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	20	50.4
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	20	50.4
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	20	50.4
(1,86)	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	20	50.4
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	5	50.3
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	12	50.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	14	50.2
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	14	50.2
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	4	50.2
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	4	50.2
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	4	50.2
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	10	50.2
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	5	50.1
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	5	50.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	5	50.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	5	50.1
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	8	50.1
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	12	50.1
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	5	50.0
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	5	50.0
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	7	49.9
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	7	49.9
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	16	49.9
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	16	49.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	2	49.9
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	11	49.8
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	12	49.8
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	12	49.8
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	4	49.7
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	20	49.7
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	20	49.7
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	18	49.6
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	18	49.6
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	1	49.6
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1	49.5
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1	49.5
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	18	49.5
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	18	49.5
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	10	49.5
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	10	49.5
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	6	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	6	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	8	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	8	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	9	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	9	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	13	49.4
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	13	49.4
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	10	49.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	10	49.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	17	49.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	17	49.3
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	14	49.3
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	14	49.3
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	6	49.3
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	3	49.2
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	3	49.2
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	14	49.2
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	14	49.2
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	10	49.2
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	2	49.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	2	49.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	11	49.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	11	49.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	13	49.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	13	49.1
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	15	49.1
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	15	49.1
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	19	49.0
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	19	49.0
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	5	49.0
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	5	49.0
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	9	48.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	9	48.9
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	2	48.9
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	2	48.9
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	11	48.9
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	11	48.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	17	48.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	17	48.9
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	6	48.8
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	6	48.8
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	10	48.8
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	10	48.8
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	20	48.8
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	20	48.8
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	13	48.8
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	5	48.7
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	5	48.7
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	2	48.7
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	4	48.6
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	4	48.6
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	14	48.6
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	14	48.6
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	12	48.5
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	12	48.5
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	19	48.5
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	19	48.5
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	8	48.4
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	8	48.4
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	7	48.4
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	3	48.4
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1	48.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	1	48.3
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	3	48.3
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	3	48.3
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	17	48.3
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	17	48.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	12	48.2
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	12	48.2
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	4	48.2
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	17	48.1
(1,79)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	17	48.1
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	14	48.1
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	10	48.1
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	14	48.1
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	3	48.0
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	3	48.0
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	15	48.0
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	15	48.0
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	11	47.9
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	11	47.9
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	15	47.9
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	15	47.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	19	47.9
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	19	47.9
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	2	47.8
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	2	47.8
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	10	47.7
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	10	47.7
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	3	47.7
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	14	47.7
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	3	47.6
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	3	47.6
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	7	47.6
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	9	47.5
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	9	47.5
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	12	47.5
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	12	47.5
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	18	47.4
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	18	47.4
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	3	47.3
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1	47.3
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	1	47.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	13	47.2
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	13	47.2
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	2	47.2
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	2	47.2
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	4	47.2
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	11	47.1
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	11	47.1
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	19	47.1
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	6	47.0
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	6	47.0
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	1	47.0
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	6	47.0
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	18	46.9
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	18	46.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	6	46.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	6	46.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	9	46.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	9	46.8
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	4	46.7
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	4	46.7
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	19	46.7
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	19	46.7
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	18	46.6
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	18	46.6
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	7	46.6
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	7	46.6
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	5	46.6
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	16	46.5
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	16	46.5
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	4	46.4
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	4	46.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	2	46.3
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	12	46.2
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	12	46.2
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	16	46.2
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	16	46.2
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	8	46.1
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	8	46.1
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	11	46.1
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	2	46.1
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	46.0
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	46.0
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	20	45.9
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	20	45.9
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	10	45.9
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	10	45.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1	45.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1	45.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	3	45.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	3	45.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	8	45.9
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	8	45.9
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	7	45.9
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	13	45.9
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	14	45.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	14	45.8
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	2	45.8
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	2	45.8
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	18	45.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	18	45.7
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	17	45.6
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	17	45.6
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	7	45.6
(1,81)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	7	45.6
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	13	45.5
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	13	45.5
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	1	45.5
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	14	45.4
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	14	45.4
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	11	45.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	11	45.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	12	45.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	12	45.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	15	45.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	15	45.3
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	11	45.3
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	4	45.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	13	45.2
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	13	45.2
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	12	45.2
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	12	45.2
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	19	45.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	6	45.1
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	6	45.1
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	14	45.1
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	14	45.1
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	6	45.0
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	6	45.0
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	8	45.0
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	8	45.0
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	3	45.0
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	2	44.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	2	44.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	11	44.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	11	44.9
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	19	44.9
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	19	44.9
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	11	44.9
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	11	44.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	13	44.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	13	44.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	20	44.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	20	44.8
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	10	44.8
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	10	44.8
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	19	44.8
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	2	44.7
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	2	44.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	16	44.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	16	44.7
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	11	44.7
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	3	44.6
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	3	44.6
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	1	44.4
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	1	44.4
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	9	44.4
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	9	44.4
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	3	44.3
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	3	44.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	5	44.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	5	44.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	18	44.3
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	18	44.3
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	13	44.3
(1,42)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	13	44.3
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	17	44.2
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	17	44.2
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	20	44.2
(1,83)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:PRO:N	20	44.2
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	18	44.2
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	10	44.2
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	12	44.1
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	12	44.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	11	44.1
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	11	44.1
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	19	44.1
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	19	44.1
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	7	44.1
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	7	44.1
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	15	44.1
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	15	44.1
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	2	44.1
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	1	44.0
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	15	44.0
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	15	44.0
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	6	44.0
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1	43.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1	43.9
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	4	43.8
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	4	43.8
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	11	43.8
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	9	43.7
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	9	43.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	5	43.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	5	43.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	9	43.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	9	43.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	20	43.6
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	20	43.6
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	8	43.6
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	4	43.5
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	4	43.5
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	17	43.5
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	7	43.4
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	7	43.4
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	10	43.3
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	10	43.3
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	8	43.3
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	8	43.3
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	17	43.3
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	17	43.3
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	14	43.3
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	7	43.2
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	7	43.2
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	15	43.2
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	15	43.2
(1,37)	1:A:39:PRO:C	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	11	43.2
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	5	43.1
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	19	43.1
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	17	43.0
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	17	43.0
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	13	43.0
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	16	42.9
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	16	42.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	10	42.9
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	10	42.9
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	2	42.9
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	8	42.9
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	10	42.9
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	9	42.8
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	9	42.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	5	42.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	5	42.8
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	3	42.8
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	3	42.8
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	16	42.8
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	16	42.8
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	20	42.8
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	20	42.8
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	2	42.7
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	2	42.7
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	9	42.7
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1	42.6
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	1	42.6
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	14	42.5
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	14	42.5
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	14	42.5
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	14	42.5
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	11	42.4
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	11	42.4
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	20	42.4
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	20	42.4
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	6	42.1
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	6	42.1
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	12	42.1
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	15	42.1
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	4	42.0
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	4	42.0
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	3	41.9
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	3	41.9
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1	41.8
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	1	41.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	18	41.8
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	18	41.8
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	5	41.8
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	5	41.8
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	1	41.8
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	3	41.7
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	3	41.7
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	4	41.7
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	4	41.7
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	20	41.6
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	20	41.6
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	15	41.6
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	15	41.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	20	41.6
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	7	41.5
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	7	41.5
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	3	41.5
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	10	41.4
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	10	41.4
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	8	41.3
(1,85)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	8	41.3
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	2	41.3
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	2	41.3
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	6	41.2
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	13	41.1
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	13	41.1
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	18	41.1
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	9	41.0
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	9	41.0
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	12	41.0
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	17	40.9
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	17	40.9
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	12	40.8
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	5	40.7
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	5	40.7
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	7	40.7
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	7	40.7
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	17	40.6
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	14	40.5
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	14	40.5
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	4	40.5
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	13	40.5
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	6	40.4
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	6	40.4
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	13	40.4
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	13	40.4
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	5	40.4
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	19	40.2
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	19	40.2
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1	40.2
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	15	40.1
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	15	40.1
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	9	40.1
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	8	40.0
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	8	40.0
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	10	40.0
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	18	39.9
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	14	39.9
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	6	39.8
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	6	39.8
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	11	39.8
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	11	39.8
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	2	39.7
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	2	39.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	16	39.7
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	16	39.7
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	5	39.6
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	5	39.6
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	3	39.6
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	6	39.6
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	7	39.6
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	16	39.6
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	16	39.5
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	16	39.5
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	11	39.5
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	15	39.5
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	19	39.4
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	19	39.4
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	2	39.4
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	7	39.4
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	8	39.3
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	8	39.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	16	39.3
(1,87)	1:A:78:VAL:N	1:A:78:VAL:CA	1:A:78:VAL:C	1:A:79:GLU:N	16	39.3
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	4	39.3
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	8	39.3
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	10	39.3
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	18	39.3
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	19	39.2
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	19	39.2
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	5	39.2
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	6	39.2
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	4	39.2
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	20	39.2
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	13	39.2
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	6	39.1
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	6	39.1
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	5	39.1
(1,116)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	19	39.1
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	3	39.0
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	3	39.0
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	18	38.9
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	18	38.9
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	8	38.9
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	8	38.8
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	8	38.8
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	17	38.8
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	4	38.7
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	4	38.7
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	12	38.7
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	12	38.7
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	15	38.7
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	15	38.7
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	16	38.7
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	18	38.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	20	38.7
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	20	38.6
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	20	38.6
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	3	38.6
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	16	38.6
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	19	38.6
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1	38.5
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1	38.5
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	9	38.5
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	9	38.5
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	11	38.4
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	11	38.4
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	12	38.4
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	12	38.4
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	13	38.4
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	6	38.4
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	12	38.3
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	12	38.3
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	13	38.3
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	1	38.2
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	20	38.2
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	5	38.2
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	10	38.2
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	7	38.1
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	7	38.1
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	2	38.1
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	14	38.1
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	9	38.0
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	4	38.0
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	12	38.0
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	11	37.9
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	11	37.9
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	12	37.9
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	16	37.9
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1	37.8
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1	37.8
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	15	37.8
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	15	37.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	13	37.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	13	37.8
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	13	37.7
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	13	37.7
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	17	37.6
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	19	37.4
(1,89)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:ALA:N	19	37.4
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	3	37.4
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	4	37.2
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	4	37.2
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	5	37.2
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	5	37.2
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	7	37.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	7	37.2
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	18	37.2
(1,40)	1:A:43:ASN:N	1:A:43:ASN:CA	1:A:43:ASN:C	1:A:44:ASP:N	18	37.2
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	1	37.2
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	12	37.1
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	12	37.1
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	15	37.1
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	15	37.1
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	14	37.1
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	18	37.0
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	18	37.0
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	9	36.8
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	9	36.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	4	36.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	4	36.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	8	36.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	8	36.8
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	10	36.7
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	10	36.7
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	8	36.6
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	9	36.5
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	9	36.5
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	17	36.5
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	2	36.4
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	2	36.4
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	10	36.3
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	10	36.3
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1	36.3
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1	36.3
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	17	36.3
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	17	36.3
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	5	36.2
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	5	36.2
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	7	36.2
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	7	36.1
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	7	36.1
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	14	35.9
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	14	35.9
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	3	35.9
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	3	35.9
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	11	35.9
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	10	35.8
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	10	35.8
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	18	35.7
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	18	35.7
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	14	35.6
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	14	35.6
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	6	35.4
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	6	35.4
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	9	35.4
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	16	35.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,46)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	16	35.2
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	16	35.1
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	13	34.6
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	13	34.6
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	17	34.6
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	17	34.6
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	8	34.5
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	6	34.4
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	7	34.4
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	19	34.3
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	19	34.3
(1,114)	1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:CA	1:A:67:ASN:C	1:A:68:ASP:N	9	34.2
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	16	34.1
(1,91)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	16	34.1
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	2	33.5
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	2	33.5
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	11	33.5
(1,77)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	11	33.5
(1,118)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	4	33.3
(1,119)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:N	18	33.1
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	17	32.9
(1,44)	1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CA	1:A:45:ILE:C	1:A:46:LEU:N	17	32.9
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	16	30.1
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	19	25.6
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	17	25.0
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	2	24.9
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	5	24.8
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	5	23.8
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	1	23.5
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	11	23.5
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	17	23.4
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	3	23.3
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	9	22.7
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	3	22.6
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	8	22.1
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	14	22.1
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	16	21.9
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1	21.9
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	9	21.8
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	2	21.7
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	14	21.6
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	20	21.3
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	17	20.7
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	18	20.6
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	6	20.5
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	4	20.3
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	7	20.1
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	8	20.1
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	13	20.0
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	10	19.9
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	10	19.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	12	19.5
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	4	19.3
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	12	19.2
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	15	19.0
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	7	18.6
(1,75)	1:A:71:TRP:N	1:A:71:TRP:CA	1:A:71:TRP:C	1:A:72:GLU:N	15	18.5
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	18	18.4
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	11	18.2
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	19	18.2
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	12	18.0
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	16	17.3
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	18	17.3
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	6	17.1
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	9	16.8
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	13	16.0
(1,48)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	20	11.0
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	20	8.1
(1,105)	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1:A:42:ILE:N	15	5.8