



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 04:43 PM EDT

PDB ID : 6XR6  
BMRB ID : 30770  
Title : Abl 1b isoform active state  
Authors : Xie, T.; Saleh, T.; Rossi, P.; Kalodimos, C.G.  
Deposited on : 2020-07-11

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at  
<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

---

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

MolProbity : 4.02b-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

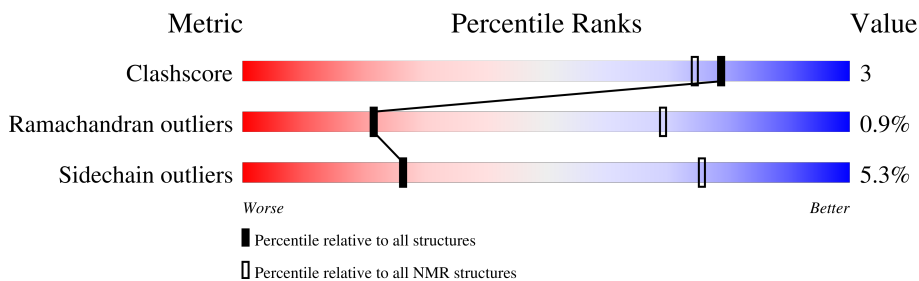
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 25%.

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  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	287	 78% 5% 16%

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:253-A:267, A:275-A:292, A:299-A:406, A:420-A:518 (240)	0.90	14

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4616 atoms, of which 2286 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Tyrosine-protein kinase ABL1.

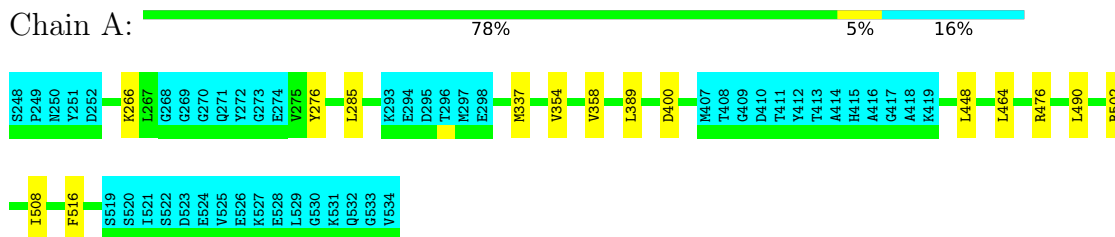
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	287	4616	1495	2286	379	439	17	0

## 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: Tyrosine-protein kinase ABL1

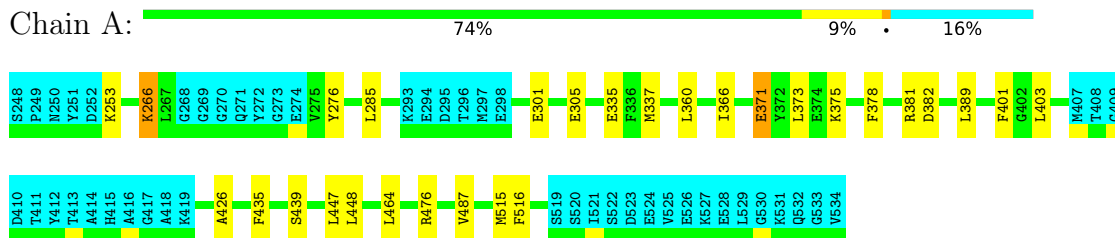


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

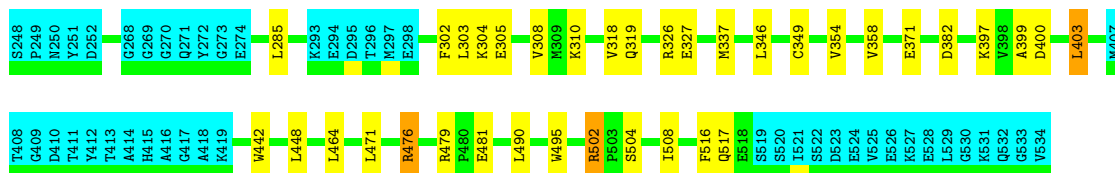
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1

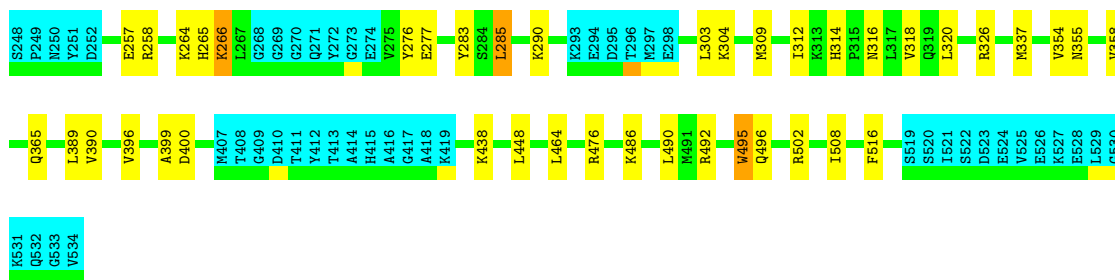




### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1

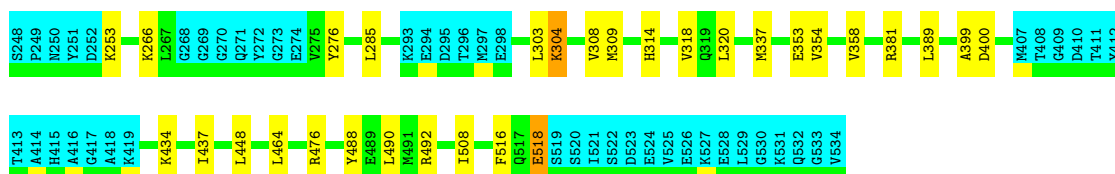
Chain A: 69% 13% 16%



### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1

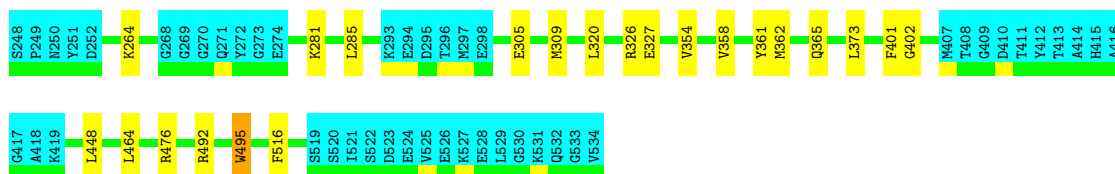
Chain A: 73% 10% 16%



### 4.2.5 Score per residue for model 5

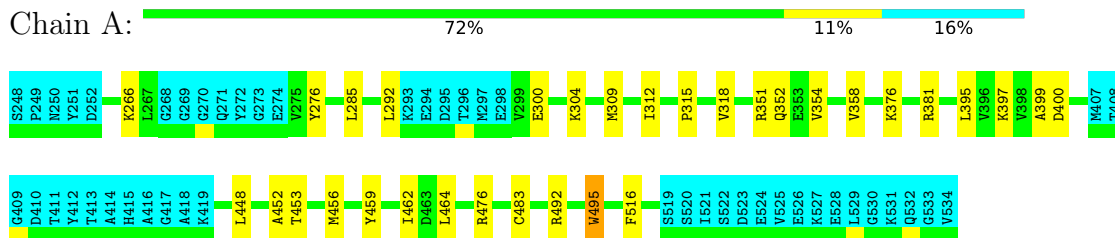
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1

Chain A: 76% 7% 16%



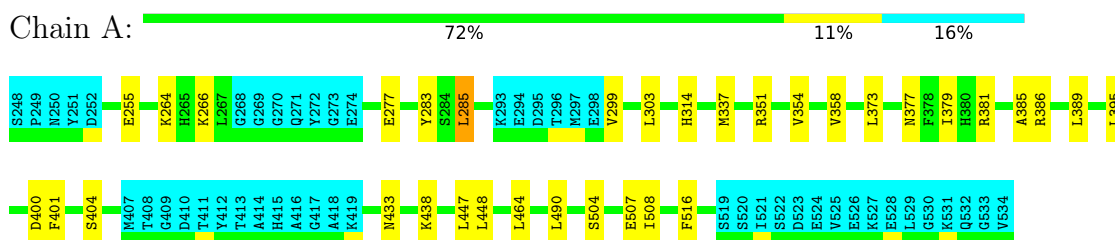
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



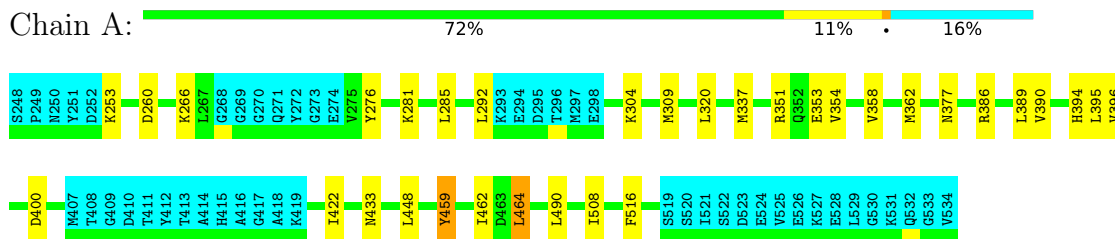
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



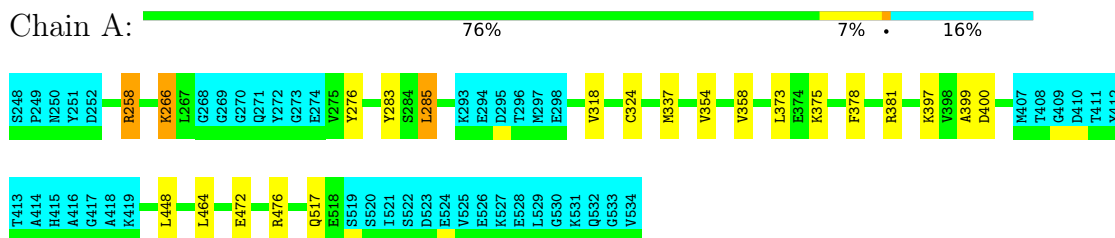
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1

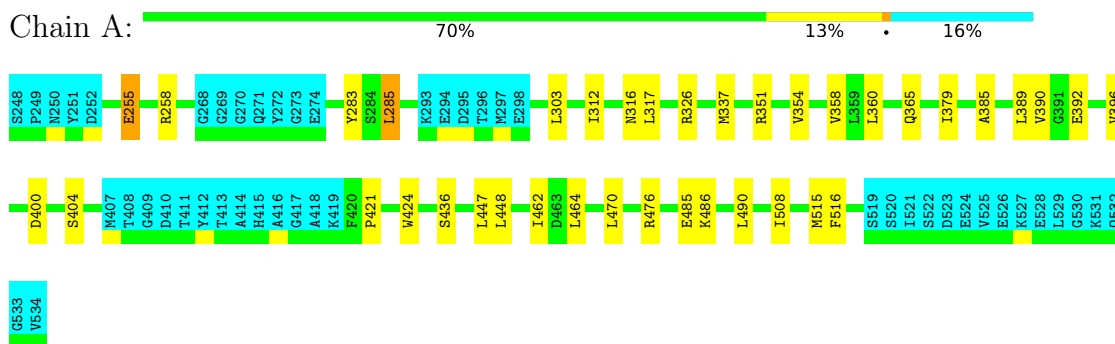






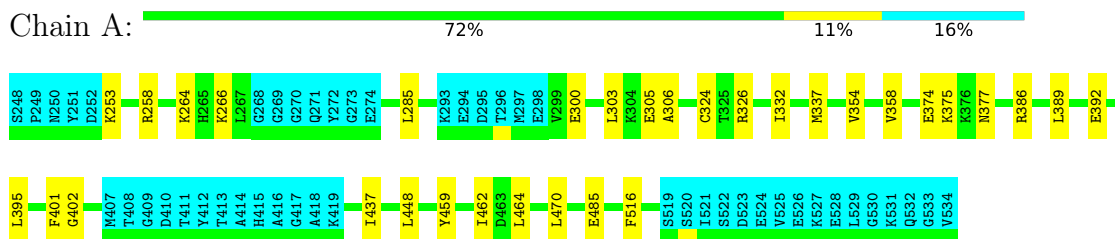
#### 4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



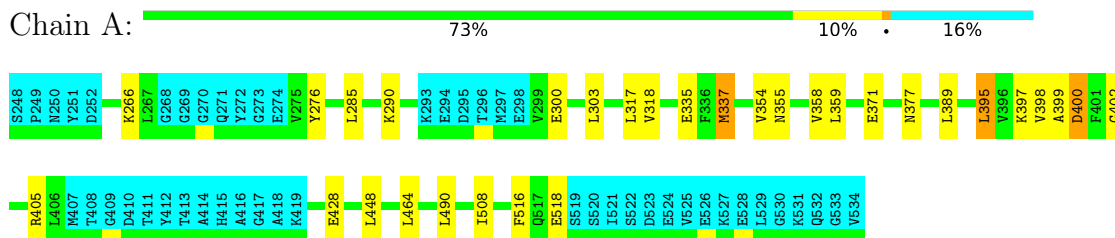
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



#### 4.2.16 Score per residue for model 16

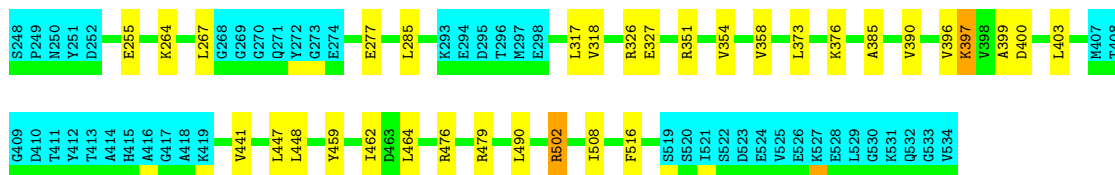
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



#### 4.2.17 Score per residue for model 17

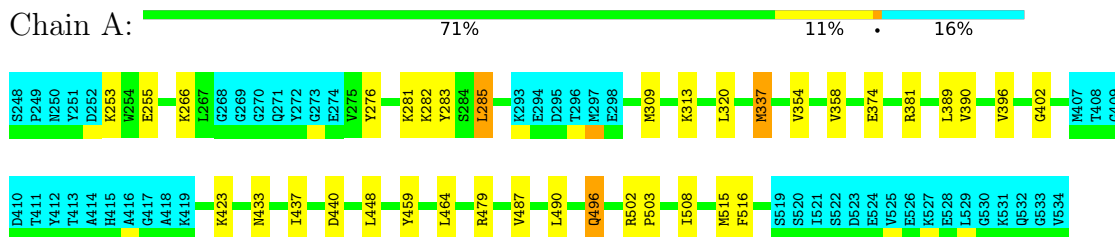
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1





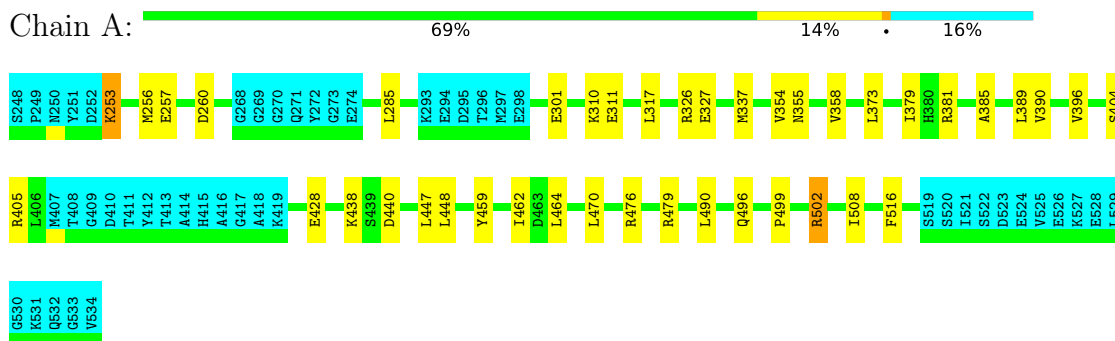
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



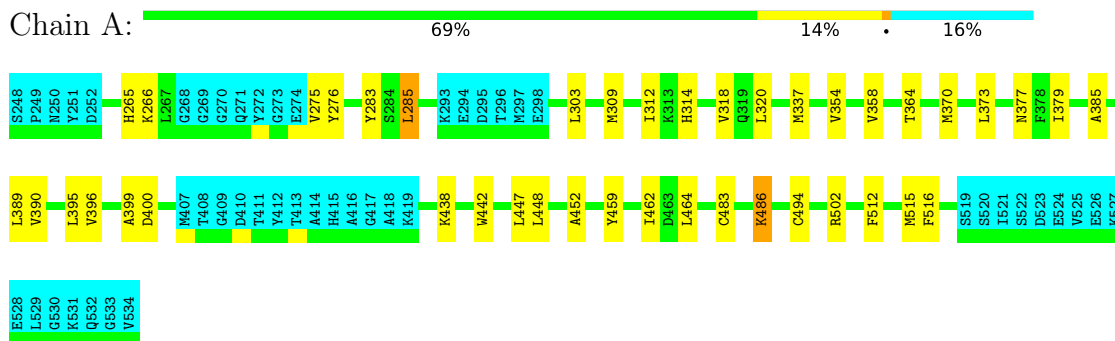
#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ABL1



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	
TALOS	geometry optimization	
CYANA	structure calculation	
PSVS	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	977
Number of shifts mapped to atoms	977
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	25%

## 6 Model quality i

### 6.1 Standard geometry i

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts i

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1983	1971	1966	11±3
All	All	39660	39420	39320	220

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 3.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:337:MET:HG2	1:A:389:LEU:HB3	0.70	1.63	13	15
1:A:358:VAL:HG22	1:A:362:MET:SD	0.64	2.33	10	1
1:A:360:LEU:HD21	1:A:515:MET:SD	0.63	2.33	10	3
1:A:309:MET:SD	1:A:320:LEU:HD13	0.62	2.35	8	4
1:A:318:VAL:HG22	1:A:337:MET:SD	0.61	2.34	2	1
1:A:354:VAL:HA	1:A:358:VAL:HG11	0.60	1.73	20	19
1:A:401:PHE:HA	1:A:404:SER:HB3	0.59	1.75	7	1
1:A:382:ASP:HB3	1:A:403:LEU:HD12	0.58	1.75	1	1
1:A:486:LYS:HD3	1:A:515:MET:SD	0.57	2.39	20	1
1:A:326:ARG:HG3	1:A:327:GLU:HG3	0.57	1.77	2	4
1:A:266:LYS:HA	1:A:276:TYR:HA	0.56	1.77	12	11
1:A:441:VAL:HG21	1:A:502:ARG:HH11	0.56	1.60	17	2
1:A:452:ALA:HB1	1:A:483:CYS:SG	0.56	2.40	11	1
1:A:253:LYS:HE2	1:A:310:LYS:HG3	0.55	1.76	19	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:492:ARG:HA	1:A:495:TRP:NE1	0.54	2.16	3	3
1:A:283:TYR:HB2	1:A:285:LEU:HD12	0.54	1.79	7	7
1:A:258:ARG:HB2	1:A:324:CYS:SG	0.53	2.43	15	1
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:MET:SD	0.53	2.44	10	1
1:A:382:ASP:HB2	1:A:403:LEU:HD23	0.52	1.82	10	1
1:A:264:LYS:HB2	1:A:277:GLU:HG3	0.52	1.81	7	3
1:A:318:VAL:HG21	1:A:399:ALA:HB2	0.51	1.81	17	9
1:A:438:LYS:HD3	1:A:499:PRO:HB2	0.51	1.82	19	2
1:A:370:MET:SD	1:A:373:LEU:HD23	0.51	2.46	20	1
1:A:395:LEU:HD11	1:A:397:LYS:HE3	0.50	1.82	13	2
1:A:504:SER:HB2	1:A:507:GLU:HG2	0.50	1.83	7	1
1:A:480:PRO:HB2	1:A:483:CYS:SG	0.50	2.46	11	1
1:A:459:TYR:HB3	1:A:462:ILE:HD11	0.50	1.84	8	8
1:A:490:LEU:HD21	1:A:508:ILE:HG23	0.50	1.84	16	11
1:A:379:ILE:O	1:A:404:SER:HA	0.49	2.07	19	2
1:A:318:VAL:HG22	1:A:397:LYS:HG3	0.49	1.84	17	1
1:A:485:GLU:HG3	1:A:486:LYS:HD2	0.48	1.84	14	1
1:A:337:MET:SD	1:A:397:LYS:NZ	0.48	2.84	2	1
1:A:318:VAL:HA	1:A:397:LYS:HE3	0.48	1.84	17	1
1:A:337:MET:SD	1:A:397:LYS:HE2	0.48	2.48	9	1
1:A:260:ASP:HA	1:A:281:LYS:NZ	0.48	2.24	11	1
1:A:436:SER:HB2	1:A:438:LYS:HG2	0.47	1.86	12	1
1:A:305:GLU:HB2	1:A:401:PHE:HB2	0.47	1.86	1	3
1:A:462:ILE:HD12	1:A:470:LEU:HD21	0.47	1.86	15	3
1:A:283:TYR:HB3	1:A:285:LEU:HD12	0.47	1.86	3	1
1:A:487:VAL:HG22	1:A:515:MET:SD	0.47	2.50	1	2
1:A:353:GLU:HB3	1:A:394:HIS:NE2	0.47	2.25	8	1
1:A:267:LEU:HD21	1:A:277:GLU:HB3	0.47	1.87	17	1
1:A:376:LYS:HE2	1:A:376:LYS:HA	0.46	1.86	17	1
1:A:390:VAL:HG22	1:A:396:VAL:HG22	0.46	1.86	19	9
1:A:316:ASN:ND2	1:A:365:GLN:HB3	0.46	2.26	14	2
1:A:381:ARG:NH2	1:A:435:PHE:HB3	0.46	2.26	1	1
1:A:309:MET:HA	1:A:312:ILE:HG12	0.46	1.87	20	3
1:A:309:MET:HE3	1:A:320:LEU:HD13	0.46	1.87	5	2
1:A:346:LEU:HA	1:A:349:CYS:SG	0.45	2.52	2	1
1:A:287:VAL:HA	1:A:336:PHE:HB2	0.45	1.88	13	1
1:A:257:GLU:HG3	1:A:259:THR:HG22	0.45	1.88	12	1
1:A:502:ARG:NH2	1:A:504:SER:HA	0.45	2.26	2	1
1:A:385:ALA:N	1:A:447:LEU:HD13	0.44	2.27	20	6
1:A:438:LYS:HB3	1:A:502:ARG:HH11	0.44	1.72	3	1
1:A:317:LEU:HD21	1:A:373:LEU:HD11	0.44	1.89	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:422:ILE:HG21	1:A:464:LEU:HD11	0.44	1.89	8	1
1:A:496:GLN:HB3	1:A:502:ARG:HB3	0.44	1.88	19	1
1:A:441:VAL:HG21	1:A:502:ARG:HD2	0.43	1.90	12	2
1:A:304:LYS:O	1:A:308:VAL:HG23	0.43	2.12	4	2
1:A:442:TRP:HZ2	1:A:471:LEU:HD22	0.43	1.73	2	1
1:A:452:ALA:HB1	1:A:483:CYS:HB2	0.43	1.90	20	2
1:A:374:GLU:HG3	1:A:437:ILE:HG21	0.43	1.91	18	2
1:A:479:ARG:NH1	1:A:481:GLU:HA	0.43	2.28	2	1
1:A:421:PRO:HB2	1:A:424:TRP:CE3	0.43	2.48	14	1
1:A:381:ARG:HH21	1:A:440:ASP:HA	0.43	1.73	18	1
1:A:502:ARG:HD2	1:A:503:PRO:HD2	0.43	1.90	18	1
1:A:305:GLU:HG3	1:A:401:PHE:HB2	0.42	1.90	5	1
1:A:306:ALA:HB2	1:A:332:ILE:HD12	0.42	1.91	15	1
1:A:257:GLU:HB2	1:A:260:ASP:HB2	0.42	1.91	11	2
1:A:265:HIS:O	1:A:277:GLU:HG2	0.42	2.15	3	1
1:A:453:THR:HB	1:A:456:MET:HB3	0.42	1.90	6	1
1:A:498:ASN:HD22	1:A:501:ASP:HB3	0.42	1.73	12	1
1:A:316:ASN:HD21	1:A:365:GLN:HB3	0.42	1.73	14	1
1:A:382:ASP:HB2	1:A:403:LEU:HD13	0.42	1.90	2	1
1:A:258:ARG:NH1	1:A:324:CYS:SG	0.42	2.93	9	1
1:A:358:VAL:O	1:A:362:MET:HG3	0.42	2.15	5	2
1:A:381:ARG:NE	1:A:381:ARG:HA	0.42	2.29	18	2
1:A:364:THR:HG22	1:A:512:PHE:HB3	0.42	1.90	20	1
1:A:426:ALA:HB2	1:A:439:SER:HA	0.42	1.90	1	1
1:A:317:LEU:HD21	1:A:373:LEU:HD21	0.42	1.91	10	3
1:A:476:ARG:HB2	1:A:495:TRP:CE3	0.42	2.49	2	1
1:A:442:TRP:HA	1:A:494:CYS:O	0.41	2.15	20	1
1:A:317:LEU:HD23	1:A:398:VAL:HB	0.41	1.92	16	1
1:A:395:LEU:HD11	1:A:397:LYS:HD2	0.41	1.92	16	1
1:A:326:ARG:HG3	1:A:327:GLU:HG2	0.41	1.91	17	1
1:A:423:LYS:HD2	1:A:459:TYR:HB2	0.41	1.93	18	1
1:A:355:ASN:O	1:A:359:LEU:HG	0.41	2.16	16	1
1:A:438:LYS:HG3	1:A:502:ARG:NE	0.41	2.31	20	1
1:A:366:ILE:HD13	1:A:447:LEU:HD21	0.41	1.92	1	1
1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:HG2	0.41	2.16	5	1
1:A:300:GLU:O	1:A:304:LYS:HB2	0.41	2.15	6	1
1:A:337:MET:HE3	1:A:391:GLY:N	0.41	2.31	13	1
1:A:312:ILE:HD12	1:A:317:LEU:HD13	0.41	1.91	14	1
1:A:371:GLU:O	1:A:375:LYS:HG2	0.40	2.15	1	1
1:A:318:VAL:HG13	1:A:335:GLU:HB3	0.40	1.92	16	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:285:LEU:O	0.40	2.17	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:302:PHE:O	1:A:305:GLU:HG2	0.40	2.17	2	1
1:A:488:TYR:O	1:A:492:ARG:HG3	0.40	2.16	4	1
1:A:309:MET:HB3	1:A:320:LEU:HB2	0.40	1.92	12	1
1:A:496:GLN:NE2	1:A:502:ARG:HD3	0.40	2.30	18	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	240/287 (84%)	228±2 (95±1%)	10±2 (4±1%)	2±1 (1±0%)	21	69
All	All	4800/5740 (84%)	4555 (95%)	201 (4%)	44 (1%)	21	69

All 6 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	516	PHE	19
1	A	400	ASP	15
1	A	402	GLY	4
1	A	518	GLU	3
1	A	292	LEU	2
1	A	403	LEU	1

### 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	215/251 (86%)	204±2 (95±1%)	11±2 (5±1%)	26	75
All	All	4300/5020 (86%)	4072 (95%)	228 (5%)	26	75

All 64 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	285	LEU	20
1	A	448	LEU	20
1	A	464	LEU	20
1	A	476	ARG	12
1	A	303	LEU	10
1	A	253	LYS	7
1	A	377	ASN	7
1	A	266	LYS	6
1	A	351	ARG	6
1	A	373	LEU	5
1	A	314	HIS	5
1	A	395	LEU	5
1	A	433	ASN	5
1	A	371	GLU	4
1	A	496	GLN	4
1	A	381	ARG	4
1	A	502	ARG	3
1	A	258	ARG	3
1	A	304	LYS	3
1	A	486	LYS	3
1	A	495	TRP	3
1	A	518	GLU	3
1	A	264	LYS	3
1	A	281	LYS	3
1	A	386	ARG	3
1	A	392	GLU	3
1	A	428	GLU	3
1	A	479	ARG	3
1	A	301	GLU	2
1	A	378	PHE	2
1	A	517	GLN	2
1	A	326	ARG	2
1	A	355	ASN	2
1	A	376	LYS	2
1	A	438	LYS	2
1	A	292	LEU	2
1	A	375	LYS	2
1	A	313	LYS	2
1	A	265	HIS	2
1	A	282	LYS	2
1	A	255	GLU	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	300	GLU	2
1	A	337	MET	2
1	A	405	ARG	2
1	A	335	GLU	1
1	A	310	LYS	1
1	A	319	GLN	1
1	A	257	GLU	1
1	A	353	GLU	1
1	A	434	LYS	1
1	A	352	GLN	1
1	A	299	VAL	1
1	A	260	ASP	1
1	A	459	TYR	1
1	A	472	GLU	1
1	A	283	TYR	1
1	A	498	ASN	1
1	A	485	GLU	1
1	A	290	LYS	1
1	A	400	ASP	1
1	A	397	LYS	1
1	A	256	MET	1
1	A	311	GLU	1
1	A	440	ASP	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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 25% for the well-defined parts and 25% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: 07102020\_active\_BMRB.cs3.str

#### 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	977
Number of shifts mapped to atoms	977
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	4

#### 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
<sup>13</sup> C <sub>α</sub>	0	—	None (insufficient data)
<sup>13</sup> C <sub>β</sub>	19	—	None (insufficient data)
<sup>13</sup> C'	0	—	None (insufficient data)
<sup>15</sup> N	164	0.36 $\pm$ 0.53	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 25%, i.e. 842 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3430. 0 out of 43 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	256/1187 (22%)	128/478 (27%)	0/480 (0%)	128/229 (56%)
Sidechain	536/1892 (28%)	402/1233 (33%)	134/593 (23%)	0/66 (0%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Aromatic	50/351 (14%)	25/169 (15%)	18/165 (11%)	7/17 (41%)
Overall	842/3430 (25%)	555/1880 (30%)	152/1238 (12%)	135/312 (43%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 25%, i.e. 977 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3978. 0 out of 46 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	327/1428 (23%)	163/579 (28%)	0/574 (0%)	164/275 (60%)
Sidechain	600/2164 (28%)	450/1406 (32%)	150/685 (22%)	0/73 (0%)
Aromatic	50/386 (13%)	25/185 (14%)	18/182 (10%)	7/19 (37%)
Overall	977/3978 (25%)	638/2170 (29%)	168/1441 (12%)	171/367 (47%)

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

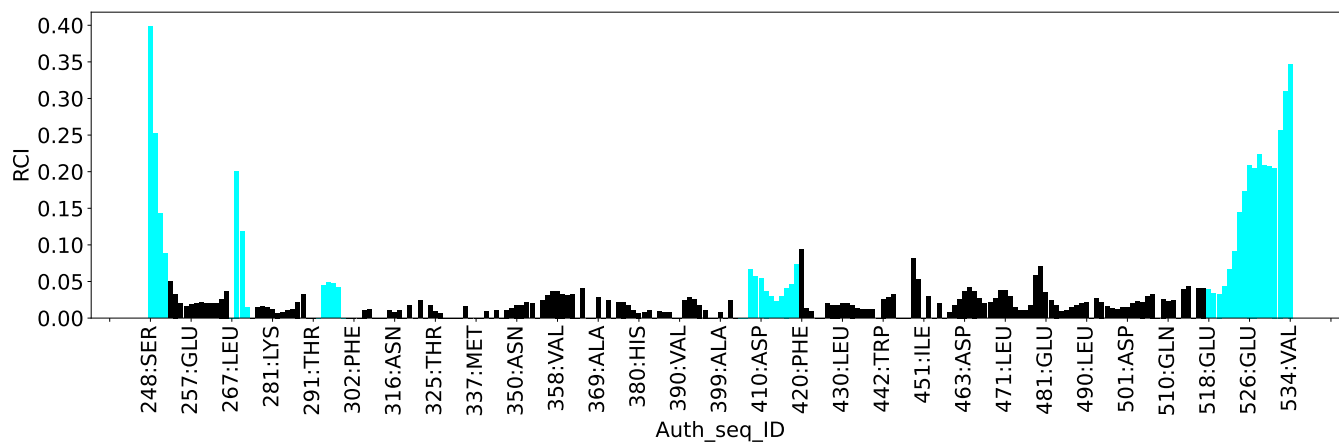
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	453	THR	HG21	-0.21	0.08 – 2.19	-6.4
1	A	453	THR	HG22	-0.21	0.08 – 2.19	-6.4
1	A	453	THR	HG23	-0.21	0.08 – 2.19	-6.4
1	A	380	HIS	H	11.79	4.92 – 11.57	5.3

#### 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	870
Intra-residue ( $ i-j =0$ )	0
Sequential ( $ i-j =1$ )	48
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	200
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	598
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	24
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	422
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	4.5
Number of long range restraints per residue <sup>1</sup>	2.1

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

### 8.2 Residual restraint violations

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)	6.7	0.2
0.2-0.5 (Medium)	4.0	0.47
>0.5 (Large)	0.3	1.02

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	171.3	10.0
10.0-20.0 (Medium)	2.9	20.0
>20.0 (Large)	22.9	176.8

## 9 Distance violation analysis [i](#)

### 9.1 Summary of distance violations [i](#)

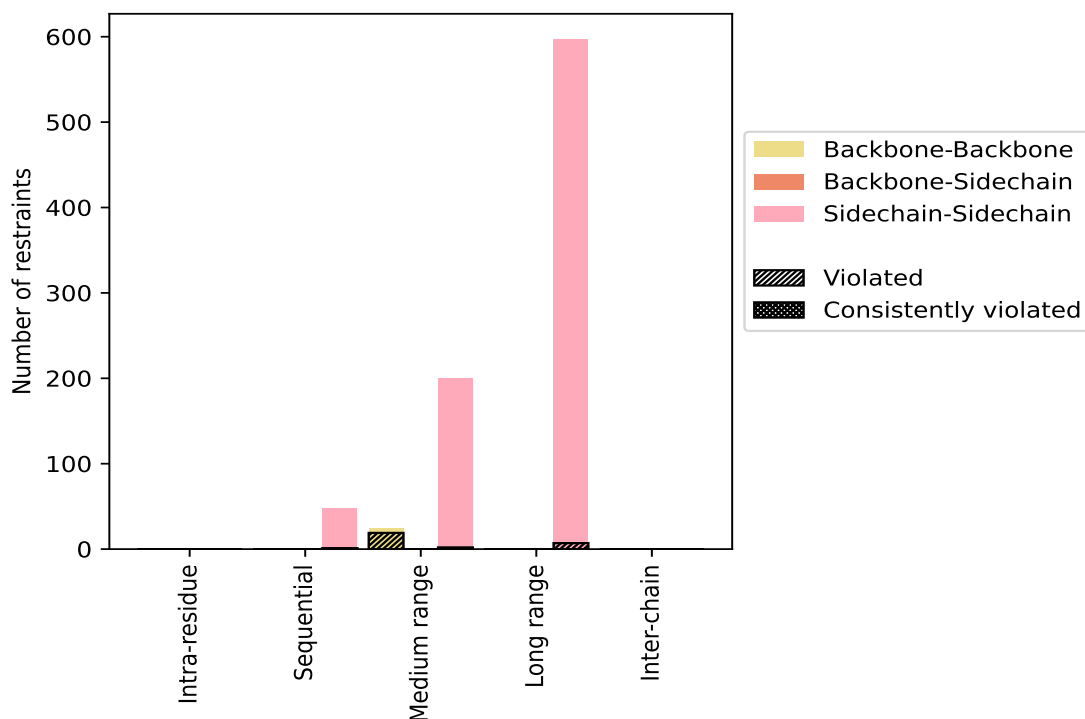
The following table shows the summary of distance violations in different restraint categories based on the sequence separation of the atoms involved. Each category is further sub-divided into three sub-categories based on the atoms involved. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Restrains type	Count	% <sup>1</sup>	Violated <sup>3</sup>			Consistently Violated <sup>4</sup>		
			Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>	Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>
<b>Intra-residue (<math> i-j =0</math>)</b>	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
<b>Sequential (<math> i-j =1</math>)</b>	48	5.5	1	2.1	0.1	1	2.1	0.1
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	48	5.5	1	2.1	0.1	1	2.1	0.1
<b>Medium range (<math> i-j &gt;1</math> &amp; <math> i-j &lt;5</math>)</b>	200	23.0	2	1.0	0.2	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	200	23.0	2	1.0	0.2	0	0.0	0.0
<b>Long range (<math> i-j \geq 5</math>)</b>	598	68.7	7	1.2	0.8	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1	0.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	597	68.6	7	1.2	0.8	0	0.0	0.0
<b>Inter-chain</b>	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
<b>Hydrogen bond</b>	24	2.8	19	79.2	2.2	0	0.0	0.0
<b>Disulfide bond</b>	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
<b>Total</b>	870	100.0	29	3.3	3.3	1	0.1	0.1
Backbone-Backbone	24	2.8	19	79.2	2.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1	0.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	845	97.1	10	1.2	1.1	1	0.1	0.1

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



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



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and 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 <sup>6</sup> (Å)	Median (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total				
1	0	1	5	3	0	9	0.18	0.23	0.04	0.17
2	0	1	4	5	0	10	0.2	0.29	0.06	0.18
3	0	1	3	2	0	6	0.18	0.25	0.04	0.18
4	0	1	5	2	0	8	0.19	0.28	0.05	0.18
5	0	1	6	5	0	12	0.24	0.45	0.11	0.19
6	0	1	1	2	0	4	0.19	0.23	0.03	0.18
7	0	1	8	3	0	12	0.38	1.02	0.28	0.24
8	0	1	7	4	0	12	0.2	0.38	0.08	0.19
9	0	1	8	4	0	13	0.2	0.39	0.07	0.19
10	0	1	8	3	0	12	0.22	0.47	0.09	0.2
11	0	1	9	3	0	13	0.2	0.31	0.06	0.18

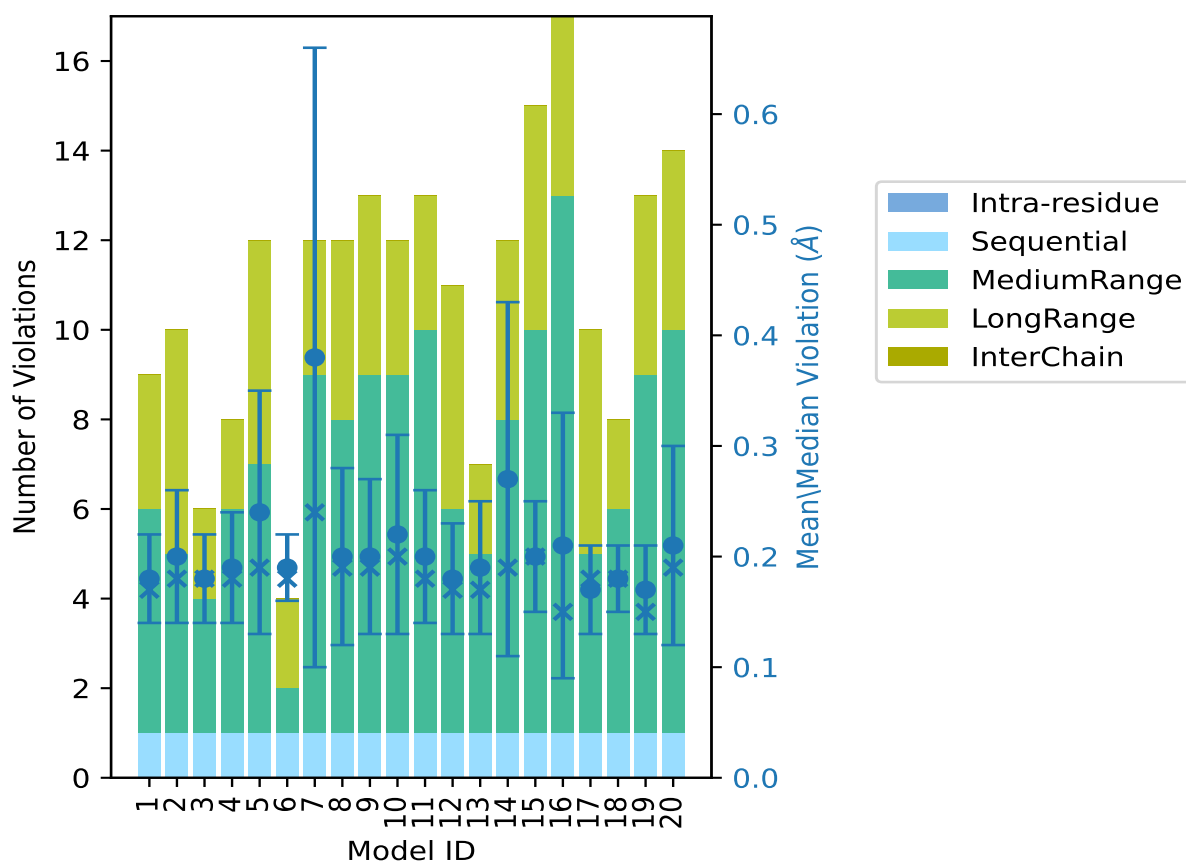
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)	SD <sup>6</sup> (Å)	Median (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>					
12	0	1	5	5	0	11	0.18	0.29	0.05	0.17
13	0	1	4	2	0	7	0.19	0.31	0.06	0.17
14	0	1	7	4	0	12	0.27	0.58	0.16	0.19
15	0	1	9	5	0	15	0.2	0.3	0.05	0.2
16	0	1	12	4	0	17	0.21	0.54	0.12	0.15
17	0	1	4	5	0	10	0.17	0.23	0.04	0.18
18	0	1	5	2	0	8	0.18	0.23	0.03	0.18
19	0	1	8	4	0	13	0.17	0.26	0.04	0.15
20	0	1	9	4	0	14	0.21	0.43	0.09	0.19

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints, <sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>Standard 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

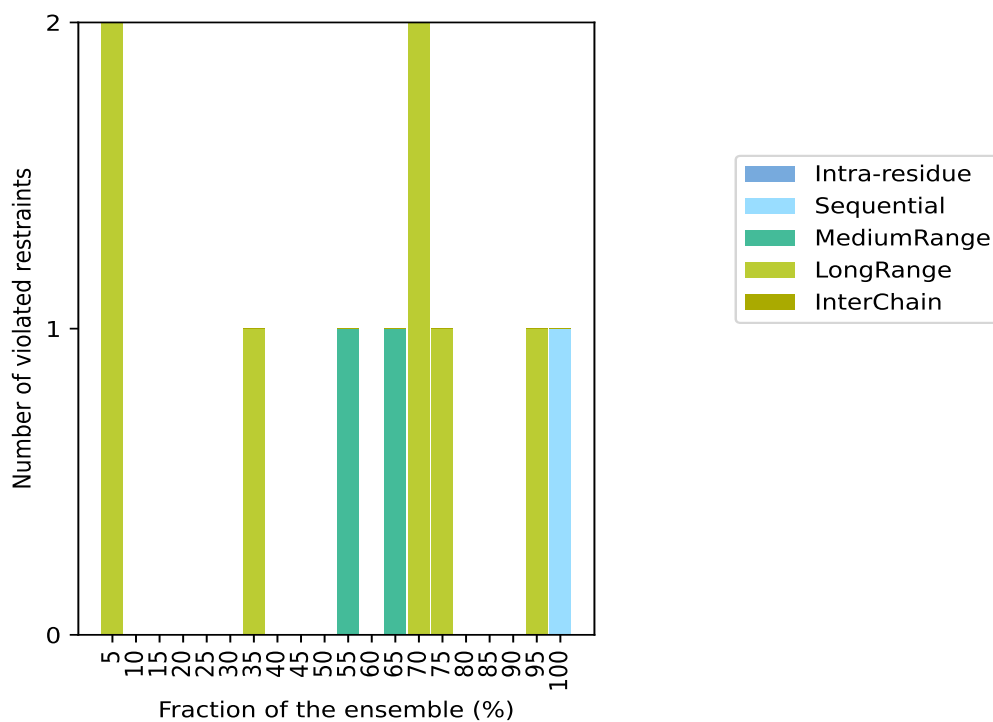
### 9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 836(IR:0, SQ:47, MR:198, LR:591, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

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

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

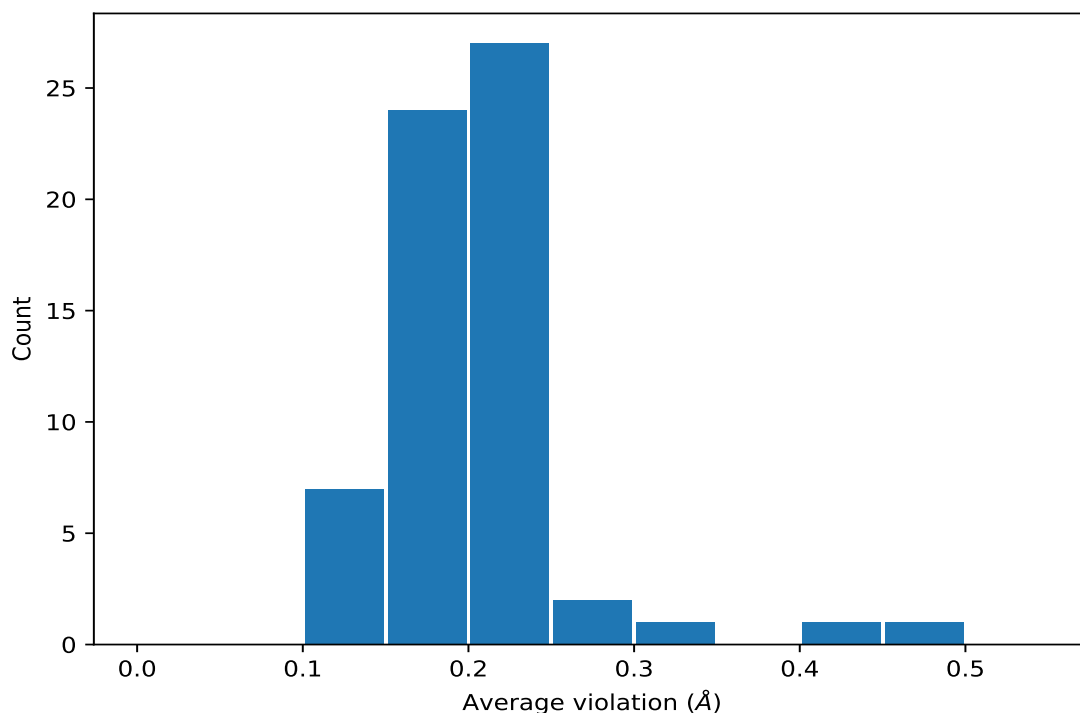
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



## 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 <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	20	0.23	0.02	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	20	0.23	0.02	0.23
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	19	0.17	0.02	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	19	0.17	0.02	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	19	0.17	0.02	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	19	0.17	0.02	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	19	0.17	0.02	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	19	0.17	0.02	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	19	0.17	0.02	0.17

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	19	0.17	0.02	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	19	0.17	0.02	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	15	0.22	0.08	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	15	0.22	0.08	0.22
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	15	0.21	0.1	0.2
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	14	0.19	0.05	0.18
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	14	0.19	0.05	0.18
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	14	0.19	0.05	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	14	0.16	0.03	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	14	0.16	0.03	0.16
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	13	0.22	0.11	0.2
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	13	0.14	0.03	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	13	0.14	0.03	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	13	0.14	0.03	0.13
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	11	0.26	0.12	0.23
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	11	0.22	0.12	0.18
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	11	0.21	0.04	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	11	0.21	0.04	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	11	0.21	0.04	0.2
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	10	0.22	0.07	0.2
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	8	0.22	0.1	0.18
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	7	0.14	0.02	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	7	0.14	0.02	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	7	0.14	0.02	0.14
(1,12)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:H	5	0.46	0.3	0.41
(1,13)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:N	5	0.16	0.04	0.15
(1,11)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:N	4	0.41	0.29	0.3
(1,7)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:N	4	0.24	0.07	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

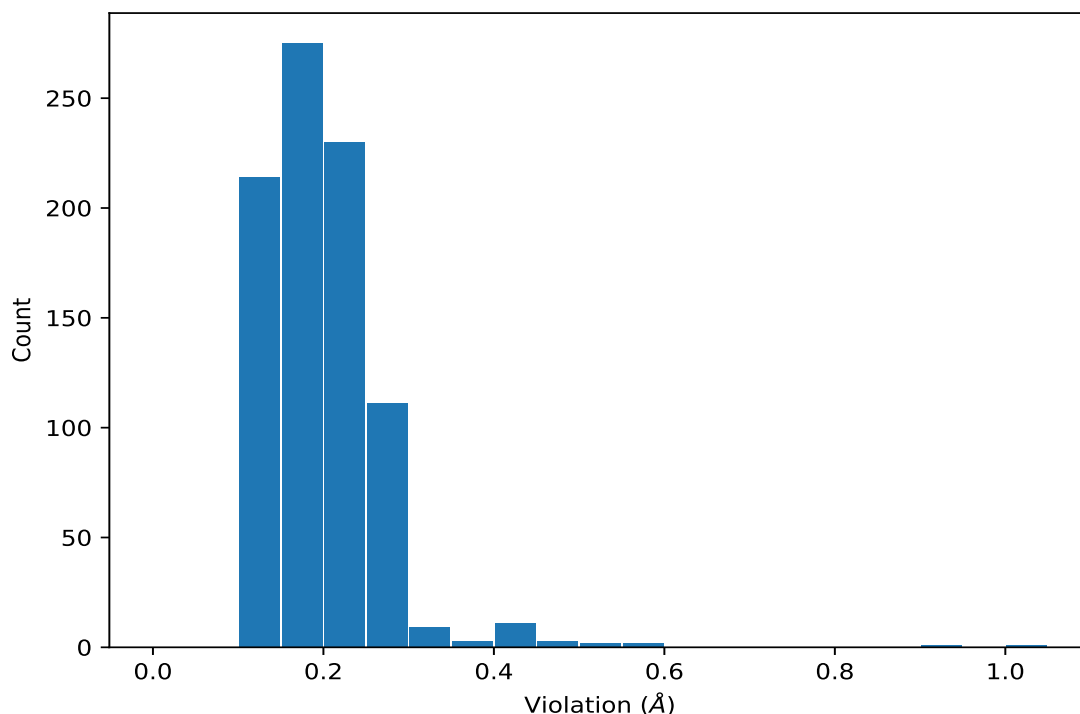
Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,24)	1:A:367:SER:O	1:A:371:GLU:H	3	0.31	0.17	0.23
(1,17)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:N	3	0.18	0.04	0.16
(1,2)	1:A:356:ALA:O	1:A:360:LEU:H	3	0.17	0.04	0.16
(1,19)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:N	2	0.29	0.18	0.29
(1,16)	1:A:363:ALA:O	1:A:367:SER:H	2	0.14	0.02	0.14

<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>Standard 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)
(1,12)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:H	7	1.02
(1,11)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:N	7	0.9
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	14	0.58
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	7	0.56
(1,24)	1:A:367:SER:O	1:A:371:GLU:H	16	0.54
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	14	0.54
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	10	0.47
(1,19)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:N	14	0.47
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	5	0.45
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	5	0.43
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	5	0.43
(1,12)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:H	20	0.43
(1,12)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:H	16	0.41
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	9	0.39
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	8	0.38
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	5	0.36
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	7	0.34
(1,7)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:N	5	0.33
(1,3)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:N	10	0.32
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	20	0.32
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	13	0.31
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	13	0.31
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	13	0.31
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	11	0.31
(1,11)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:N	20	0.31
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	15	0.3
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	8	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	8	0.29

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	8	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	8	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	8	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	8	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	8	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	8	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	8	0.29
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	12	0.29
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	12	0.29
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	12	0.29
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	2	0.29
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	15	0.29
(1,12)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:H	11	0.29
(1,11)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:N	16	0.29
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	9	0.28
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	9	0.28
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	4	0.28
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	4	0.27
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	4	0.27
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	4	0.27
(1,7)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:N	8	0.27
(1,23)	1:A:367:SER:O	1:A:371:GLU:N	16	0.27
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	15	0.27
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	16	0.27
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	2	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	14	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	14	0.26

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	14	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	14	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	14	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	14	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	14	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	14	0.26
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	14	0.26
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	19	0.26
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	19	0.26
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	19	0.26
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	2	0.25
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	2	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	3	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	7	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	8	0.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	8	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	16	0.25
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	16	0.25
(1,9)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:N	7	0.25
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	20	0.25
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	11	0.25
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	12	0.24
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	12	0.24
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	12	0.24
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	16	0.24
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	16	0.24
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	16	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	9	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	15	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	19	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	19	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	19	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	19	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	19	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	19	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	19	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	19	0.24
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	19	0.24
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	10	0.24
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	10	0.24
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	10	0.24
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	2	0.24
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	10	0.24
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	15	0.24
(1,17)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:N	14	0.24
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	11	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	12	0.23
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	12	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	1	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	13	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	13	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	17	0.23
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	17	0.23
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	18	0.23
(1,24)	1:A:367:SER:O	1:A:371:GLU:H	17	0.23
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	6	0.23
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	7	0.22
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	7	0.22
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	7	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	20	0.22
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	11	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	20	0.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	20	0.22
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	20	0.22
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	7	0.22
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	1	0.22
(1,2)	1:A:356:ALA:O	1:A:360:LEU:H	10	0.22
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	1	0.22
(1,13)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:N	7	0.22
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	10	0.21
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	10	0.21
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	10	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	15	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	19	0.21
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	19	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	4	0.21

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	4	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	5	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	18	0.21
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	18	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	5	0.21
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	5	0.21
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	14	0.21
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	14	0.21
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	14	0.21
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	9	0.21
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	9	0.21
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	17	0.21
(2,88)	1:A:337:MET:HE1	1:A:389:LEU:CD1	2	0.2
(2,88)	1:A:337:MET:HE2	1:A:389:LEU:CD1	2	0.2
(2,88)	1:A:337:MET:HE3	1:A:389:LEU:CD1	2	0.2
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	15	0.2
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	15	0.2
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	15	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	8	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	8	0.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	8	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	8	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	8	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	8	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	8	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	8	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	8	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	12	0.2
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	12	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	11	0.2
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	11	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	10	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	10	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	10	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	15	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	15	0.2
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	15	0.2
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	20	0.2
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	12	0.2
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	18	0.2
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	8	0.2
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	15	0.2
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	3	0.19
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	3	0.19
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	3	0.19
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	3	0.19
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	3	0.19
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	3	0.19

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	3	0.19
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	3	0.19
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	3	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	6	0.19
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	6	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	10	0.19
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	10	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	4	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	9	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	17	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	17	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	17	0.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	17	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	17	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	17	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	17	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	17	0.19
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	17	0.19
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	3	0.19
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	9	0.19
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	9	0.19
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	9	0.18
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	9	0.18
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	9	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	11	0.18
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	11	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	19	0.18
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	19	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG21	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG22	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD21	1:A:286:THR:HG23	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG21	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG22	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD22	1:A:286:THR:HG23	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG21	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG22	6	0.18
(2,690)	1:A:285:LEU:HD23	1:A:286:THR:HG23	6	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	8	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	8	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	16	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	18	0.18
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	18	0.18
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	7	0.18
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	7	0.18
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	7	0.18
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	20	0.18
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	20	0.18
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	20	0.18
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	1	0.18
(1,7)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:N	15	0.18
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	13	0.18
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	4	0.18
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	17	0.18
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	10	0.18
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	5	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	5	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	5	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	14	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	14	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	14	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	17	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	17	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	17	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	1	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	7	0.17
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	7	0.17
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	7	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	1	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	3	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	3	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	10	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	12	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	20	0.17
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	20	0.17
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	5	0.17
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	5	0.17
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	5	0.17
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	13	0.17
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	13	0.17
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	13	0.17
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	18	0.17
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	18	0.17
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	18	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,7)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:N	2	0.17
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	9	0.17
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	11	0.17
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	1	0.16
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	1	0.16
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	1	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	12	0.16
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	12	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	6	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	13	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	14	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	14	0.16

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	15	0.16
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	15	0.16
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	15	0.16
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	15	0.16
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	15	0.16
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	19	0.16
(1,2)	1:A:356:ALA:O	1:A:360:LEU:H	18	0.16
(1,17)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:N	5	0.16
(1,16)	1:A:363:ALA:O	1:A:367:SER:H	14	0.16
(1,13)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:N	11	0.16
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	19	0.15
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	19	0.15
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	19	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	4	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	5	0.15
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	5	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	14	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	14	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	17	0.15
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	17	0.15
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	12	0.15
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	12	0.15
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	12	0.15
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	18	0.15
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	18	0.15
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	18	0.15
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	14	0.15
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	14	0.15
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	14	0.15
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD11	3	0.15
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD12	3	0.15
(2,10)	1:A:369:ALA:CB	1:A:373:LEU:HD13	3	0.15
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	11	0.15
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	15	0.15
(1,24)	1:A:367:SER:O	1:A:371:GLU:H	20	0.15
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	12	0.15
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	16	0.15
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	2	0.15
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	19	0.15
(1,17)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:N	9	0.15
(1,13)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:N	16	0.15
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	5	0.15
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	8	0.15
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	19	0.15
(2,679)	1:A:318:VAL:HG21	1:A:399:ALA:HB1	17	0.14
(2,679)	1:A:318:VAL:HG21	1:A:399:ALA:HB2	17	0.14
(2,679)	1:A:318:VAL:HG21	1:A:399:ALA:HB3	17	0.14
(2,679)	1:A:318:VAL:HG22	1:A:399:ALA:HB1	17	0.14

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,679)	1:A:318:VAL:HG22	1:A:399:ALA:HB2	17	0.14
(2,679)	1:A:318:VAL:HG22	1:A:399:ALA:HB3	17	0.14
(2,679)	1:A:318:VAL:HG23	1:A:399:ALA:HB1	17	0.14
(2,679)	1:A:318:VAL:HG23	1:A:399:ALA:HB2	17	0.14
(2,679)	1:A:318:VAL:HG23	1:A:399:ALA:HB3	17	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	2	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD21	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD22	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG11	1:A:389:LEU:HD23	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD21	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD22	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG12	1:A:389:LEU:HD23	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD21	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD22	19	0.14
(2,612)	1:A:318:VAL:HG13	1:A:389:LEU:HD23	19	0.14
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	5	0.14
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	5	0.14
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	5	0.14
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	15	0.14
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	15	0.14
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	15	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	2	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	2	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	2	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	8	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	8	0.14
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	8	0.14
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	16	0.14
(1,4)	1:A:357:VAL:O	1:A:361:TYR:H	19	0.14
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	11	0.14
(1,13)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:N	20	0.14
(1,12)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:H	4	0.14
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	18	0.13
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	18	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	18	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	16	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	16	0.13
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	16	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	8	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	8	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	8	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	11	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	11	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	11	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	13	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	13	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	13	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	19	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	19	0.13
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	19	0.13
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	19	0.13
(1,20)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:H	8	0.13
(1,18)	1:A:364:THR:O	1:A:368:SER:H	16	0.13
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	4	0.13
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	14	0.13
(1,14)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:H	19	0.13
(1,11)	1:A:361:TYR:O	1:A:365:GLN:N	11	0.13
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	1	0.13
(1,1)	1:A:356:ALA:O	1:A:360:LEU:N	10	0.13
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	9	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	9	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	17	0.12
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	17	0.12
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	20	0.12
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	20	0.12
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	20	0.12
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	12	0.12
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	12	0.12
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	12	0.12
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	13	0.12
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	17	0.12
(1,2)	1:A:356:ALA:O	1:A:360:LEU:H	8	0.12
(1,16)	1:A:363:ALA:O	1:A:367:SER:H	16	0.12
(2,805)	1:A:308:VAL:HG21	1:A:378:PHE:HE2	20	0.11
(2,805)	1:A:308:VAL:HG22	1:A:378:PHE:HE2	20	0.11
(2,805)	1:A:308:VAL:HG23	1:A:378:PHE:HE2	20	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD21	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD22	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG21	1:A:285:LEU:HD23	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD21	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD22	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG22	1:A:285:LEU:HD23	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD21	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD22	2	0.11
(2,746)	1:A:279:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HD23	2	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD11	10	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD12	10	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD11	1:A:395:LEU:HD13	10	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD11	10	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD12	10	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD12	1:A:395:LEU:HD13	10	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD11	10	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD12	10	0.11
(2,724)	1:A:389:LEU:HD13	1:A:395:LEU:HD13	10	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	3	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	3	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	3	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	9	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	9	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	9	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG21	16	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG22	16	0.11
(2,454)	1:A:354:VAL:CG1	1:A:358:VAL:HG23	16	0.11
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD21	20	0.11
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD22	20	0.11
(2,216)	1:A:318:VAL:CG2	1:A:389:LEU:HD23	20	0.11
(1,8)	1:A:359:LEU:O	1:A:363:ALA:H	12	0.11
(1,19)	1:A:365:GLN:O	1:A:369:ALA:N	15	0.11
(1,13)	1:A:362:MET:O	1:A:366:ILE:N	1	0.11
(1,10)	1:A:360:LEU:O	1:A:364:THR:H	16	0.11

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

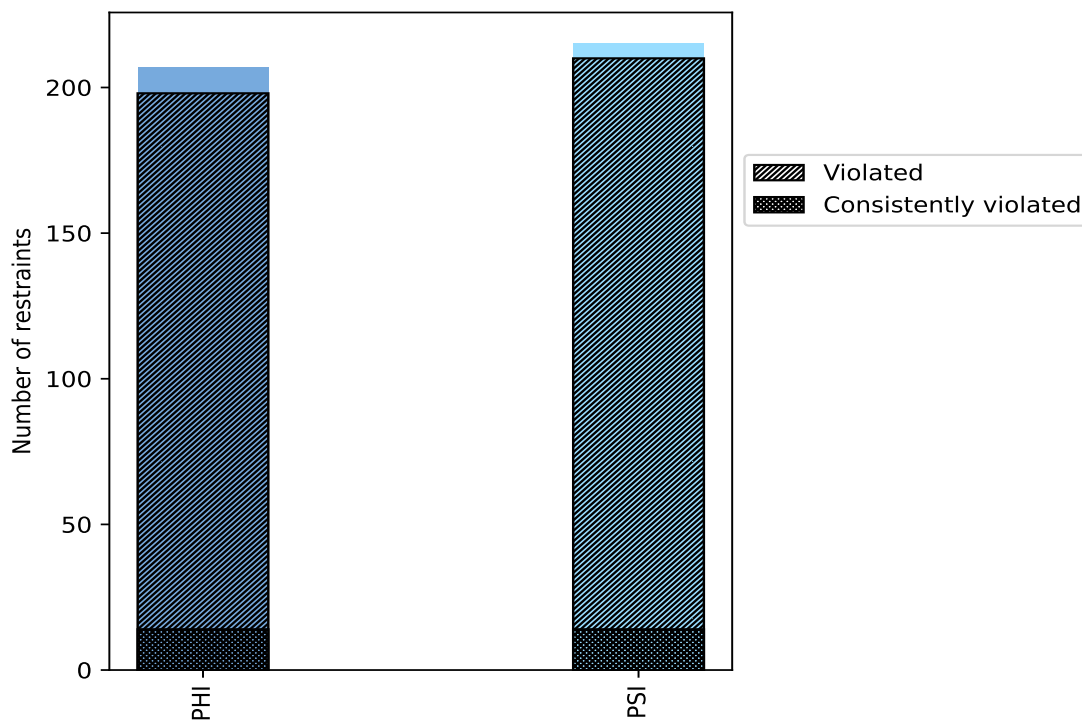
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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	% <sup>1</sup>	Violated <sup>3</sup>			Consistently Violated <sup>4</sup>		
			Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>	Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>
PHI	207	49.1	198	95.7	46.9	14	6.8	3.3
PSI	215	50.9	210	97.7	49.8	14	6.5	3.3
Total	422	100.0	408	96.7	96.7	28	6.6	6.6

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

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



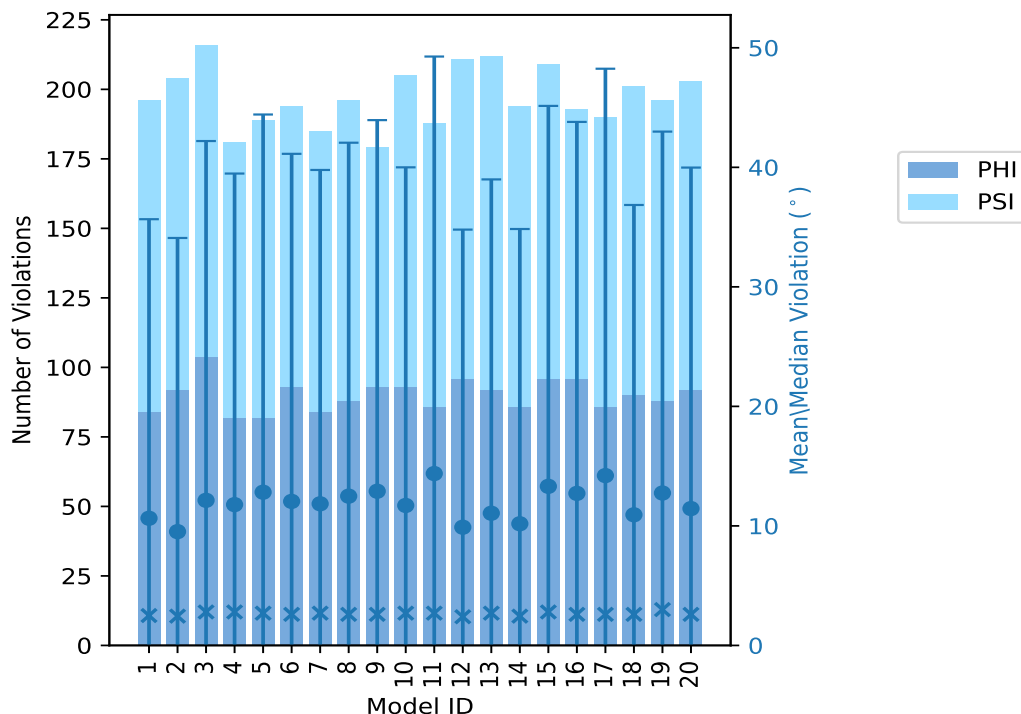
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

## 10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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	84	112	196	10.64	164.4	25.02	2.5
2	92	112	204	9.52	165.4	24.57	2.45
3	104	112	216	12.14	163.4	30.06	2.8
4	82	99	181	11.78	159.6	27.7	2.8
5	82	107	189	12.82	172.9	31.6	2.7
6	93	101	194	12.05	169.1	29.08	2.6
7	84	101	185	11.85	165.7	27.93	2.7
8	88	108	196	12.49	174.6	29.57	2.6
9	93	86	179	12.9	176.5	31.05	2.6
10	93	112	205	11.71	164.6	28.29	2.7
11	86	102	188	14.38	176.8	34.89	2.7
12	96	115	211	9.89	155.5	24.9	2.4
13	92	120	212	11.06	168.2	27.93	2.7
14	86	108	194	10.18	173.2	24.66	2.45
15	96	113	209	13.31	161.8	31.83	2.8
16	96	97	193	12.72	175.9	31.08	2.6
17	86	104	190	14.21	176.6	34.04	2.6
18	90	111	201	10.93	171.4	25.92	2.6
19	88	108	196	12.75	172.8	30.24	3.0
20	92	111	203	11.45	170.9	28.53	2.6

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



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

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

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count <sup>1</sup>	%
14	1	15	1	5.0
8	8	16	2	10.0
13	7	20	3	15.0
9	12	21	4	20.0
6	13	19	5	25.0
20	13	33	6	30.0
17	13	30	7	35.0
18	24	42	8	40.0
14	19	33	9	45.0
17	16	33	10	50.0
6	16	22	11	55.0

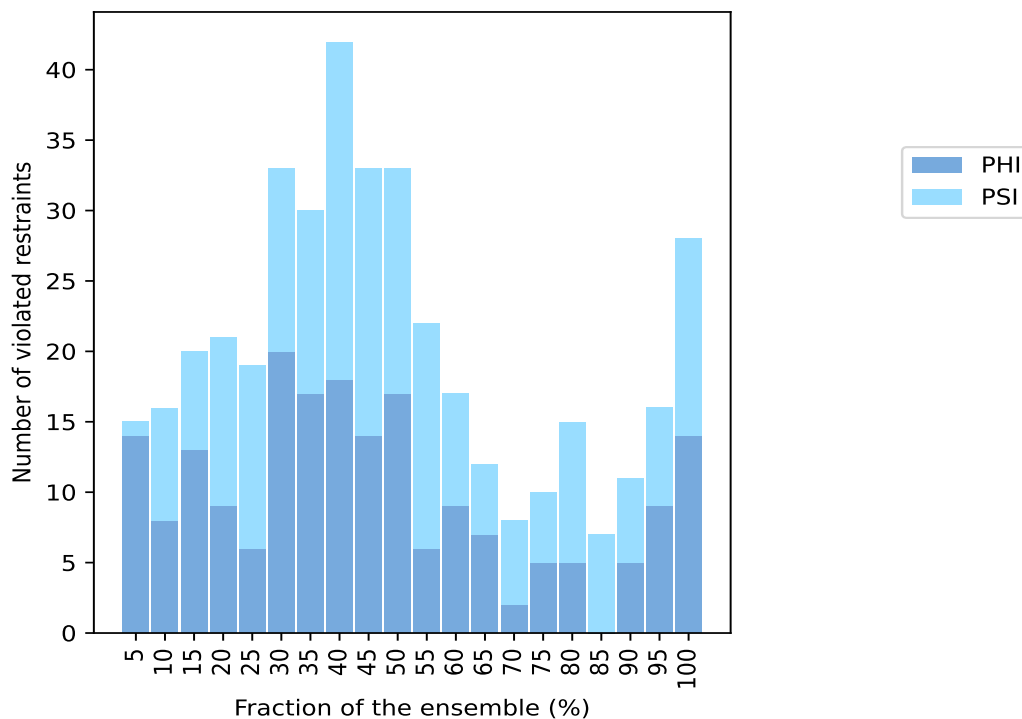
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count <sup>1</sup>	%
9	8	17	12	60.0
7	5	12	13	65.0
2	6	8	14	70.0
5	5	10	15	75.0
5	10	15	16	80.0
0	7	7	17	85.0
5	6	11	18	90.0
9	7	16	19	95.0
14	14	28	20	100.0

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

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



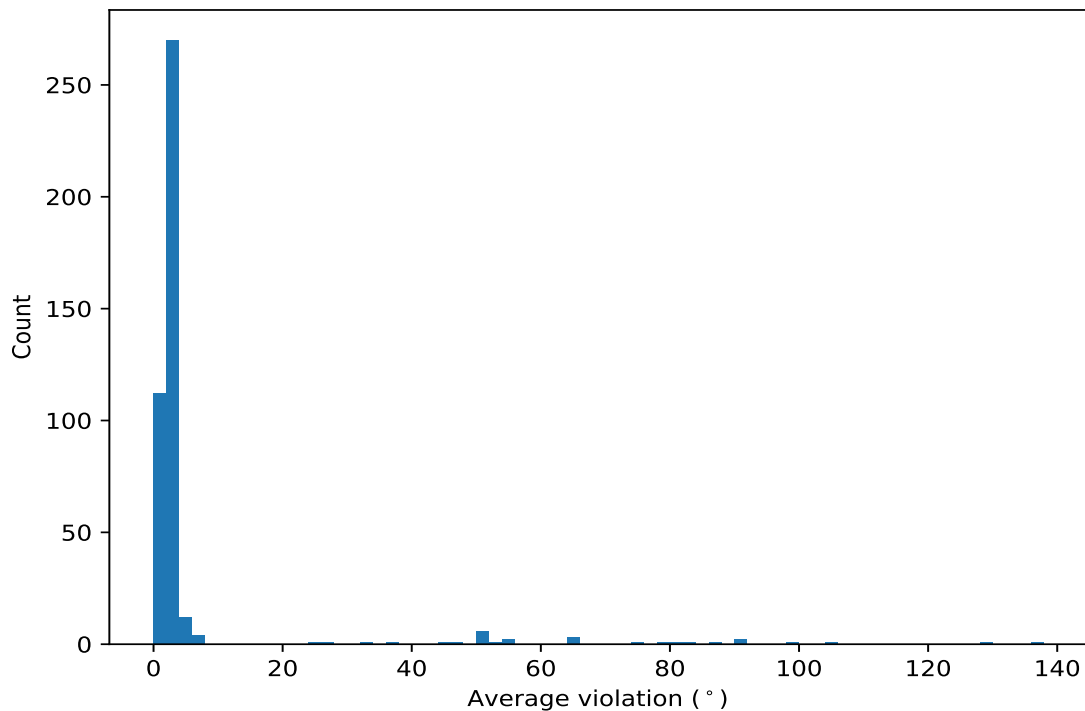
## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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

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



in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	20	128.92	39.41	146.4
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	20	105.52	41.04	95.35
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	20	90.11	30.62	94.15
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	20	87.3	59.11	86.75
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	20	80.77	5.37	81.3
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	20	79.29	50.48	75.9
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	20	75.01	28.23	79.0
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	20	65.49	51.21	63.9
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	20	65.26	58.82	44.0
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	20	64.36	48.79	52.5
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	20	55.98	45.86	48.65
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	20	55.78	52.12	31.5
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	20	53.1	29.22	50.6
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	20	51.61	39.55	44.2
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	20	51.2	6.87	51.8
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	20	50.36	28.41	48.45
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	20	50.11	54.87	25.3
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	20	47.97	33.99	47.05
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	20	33.74	34.13	34.45
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	20	24.27	16.77	18.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	20	6.7	1.6	7.1
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	20	6.13	2.05	6.7
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	20	4.1	1.35	4.05
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	20	3.5	0.84	3.55
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	20	3.43	0.98	3.2
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	20	2.92	1.21	3.0
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	20	2.37	0.6	2.35
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	20	2.33	0.9	2.1
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	20	2.33	0.9	2.1
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	19	136.28	19.06	131.1
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	19	90.86	47.32	86.2
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	19	51.65	41.92	32.4
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	19	50.52	32.29	45.4
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	19	44.22	42.74	21.7
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	19	4.72	2.07	5.2
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	19	4.03	2.09	3.5
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	19	3.87	1.61	3.4
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	19	3.69	2.01	3.5
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	19	3.69	2.01	3.5
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	19	3.6	1.13	3.5
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	19	3.45	1.25	3.4
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	19	3.42	1.29	3.6
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	19	3.31	1.24	3.5
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	19	2.82	1.12	2.4
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	19	2.73	1.06	2.8
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	19	2.23	0.67	2.2
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	18	99.14	49.49	114.25
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	18	82.54	54.77	56.8
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	18	37.82	23.84	33.6
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	18	26.94	16.76	22.1
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	18	5.45	2.19	4.8
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	18	4.44	1.6	3.55
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	18	4.41	1.67	4.15
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	18	4.19	1.19	4.35
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	18	3.68	2.02	3.4
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	18	3.67	1.51	3.6
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	18	2.48	0.74	2.55
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	17	3.89	1.87	3.2
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	17	3.37	1.41	3.2
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	17	3.17	1.6	2.7
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	17	3.05	1.29	2.6
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	17	2.79	1.35	2.2
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	17	2.6	1.01	2.5
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	17	2.34	0.72	2.2
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	17	2.34	0.72	2.2
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	16	5.86	2.28	6.0
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	16	4.73	1.86	4.2
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	16	4.52	1.8	4.2
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	16	3.3	1.17	3.15
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	16	3.3	1.71	3.1
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	16	3.26	1.23	3.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	16	2.92	1.26	2.85
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	16	2.88	1.67	2.5
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	16	2.74	1.13	2.5
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	16	2.46	1.12	2.4
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	16	2.46	1.09	2.5
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	16	2.42	0.57	2.25
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	16	2.38	1.11	1.95
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	16	2.33	1.02	2.15
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	16	2.33	1.02	2.15
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	16	2.17	0.78	2.2
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	15	3.72	1.56	3.7
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	15	3.14	0.97	3.1
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	15	3.01	1.0	2.9
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	15	2.92	1.37	3.0
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	15	2.88	1.52	2.8
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	15	2.85	1.01	3.0
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	15	2.75	0.82	2.9
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	15	2.59	0.95	2.6
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	15	2.51	1.12	1.9
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	15	2.39	0.94	2.4
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	14	6.18	2.15	6.55
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	14	6.18	2.15	6.55
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	14	3.36	1.53	3.6
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	14	3.1	1.13	2.75
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	14	2.51	0.99	2.2
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	14	2.47	1.05	2.4
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	14	2.37	1.05	2.1
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	14	2.31	0.91	2.2
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	14	1.96	0.65	1.95
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	13	3.55	2.2	2.9
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	13	3.55	2.2	2.9
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	13	3.22	0.71	3.0
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	13	3.09	1.07	2.9
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	13	2.83	1.17	2.7
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	13	2.74	1.1	2.9
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	13	2.52	1.84	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	13	2.52	1.84	1.8
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	13	2.41	1.26	1.7
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	13	2.37	0.75	2.8
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	13	2.25	0.69	2.0
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	13	2.17	1.78	1.7
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	13	2.17	1.78	1.7
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	13	1.85	0.55	1.8
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	13	1.75	0.55	1.7
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	12	3.88	1.77	3.7
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	12	3.6	1.04	3.75
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	12	3.03	1.66	2.6
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	12	3.03	1.66	2.6
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	12	2.88	1.16	2.75
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	12	2.73	1.15	2.65
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	12	2.5	1.28	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	12	2.5	1.28	1.8
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	12	2.47	1.11	2.05
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	12	2.41	0.94	2.25
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	12	2.41	1.03	2.3
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	12	2.39	0.7	2.65
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	12	2.33	0.82	2.5
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	12	2.31	0.82	2.0
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	12	2.28	0.82	2.1
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	12	2.24	0.85	2.2
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	12	1.94	0.73	1.7
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	12	1.88	1.02	1.5
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	12	1.72	0.58	1.55
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	11	4.04	2.35	3.3
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	11	3.93	2.01	3.5
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	11	3.93	2.01	3.5
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	11	3.64	1.91	2.6
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	11	3.62	1.67	3.2
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	11	3.5	1.14	3.5
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	11	3.19	1.49	3.1
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	11	2.98	1.29	3.0
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	11	2.96	1.12	3.1
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	11	2.86	1.68	2.0
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	11	2.66	0.91	2.8
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	11	2.58	0.76	2.7
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	11	2.57	0.76	2.8
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	11	2.38	1.15	2.3
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	11	2.38	1.15	2.3
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	11	2.35	1.03	2.0
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	11	2.21	0.72	2.0
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	11	2.17	0.85	1.6
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	11	2.16	1.07	1.8
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	11	2.16	1.07	1.8
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	11	1.96	0.6	1.9
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	11	1.92	0.77	1.7
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	11	1.92	1.0	1.5
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	11	1.78	0.5	1.6
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	11	1.71	0.39	1.7
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	10	4.21	1.33	3.95
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	10	3.58	1.72	3.05
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	10	3.44	1.49	3.05
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	10	3.19	1.46	3.2
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	10	3.13	1.44	2.8
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	10	2.9	0.76	3.0
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	10	2.83	1.11	2.65
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	10	2.82	0.81	2.85
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	10	2.77	1.56	2.3
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	10	2.77	0.78	2.6
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	10	2.7	1.12	2.7
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	10	2.67	1.05	2.35
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	10	2.53	1.05	2.25
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	10	2.5	1.25	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	10	2.46	1.03	2.35
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	10	2.38	1.0	2.35
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	10	2.36	0.6	2.35
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	10	2.36	0.65	2.45
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	10	2.36	0.65	2.45
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	10	2.36	0.97	2.05
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	10	2.32	0.99	2.1
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	10	2.28	1.16	2.0
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	10	2.22	0.51	2.35
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	10	2.18	0.86	1.8
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	10	2.17	0.56	2.05
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	10	2.16	0.58	2.1
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	10	2.08	0.78	1.9
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	10	2.06	1.05	1.65
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	10	2.06	0.71	1.75
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	10	1.84	0.49	1.75
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	10	1.81	0.81	1.55
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	10	1.81	0.4	1.8
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	10	1.79	0.6	1.6
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	10	1.78	0.52	1.7
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	9	3.6	2.07	2.8
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	9	3.24	1.32	3.6
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	9	3.2	1.48	3.4
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	9	3.14	1.18	3.1
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	9	3.08	1.87	2.9
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	9	2.97	1.31	2.5
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	9	2.88	1.12	3.4
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	9	2.8	0.68	2.8
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	9	2.78	1.0	2.8
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	9	2.76	0.99	2.8
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	9	2.71	0.82	2.6
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	9	2.71	1.31	2.4
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	9	2.68	1.31	2.1
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	9	2.68	1.01	2.9
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	9	2.64	1.0	2.3
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	9	2.58	1.27	2.6
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	9	2.53	0.85	2.7
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	9	2.44	0.86	2.4
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	9	2.43	0.74	2.4
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	9	2.4	0.93	2.5
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	9	2.38	1.09	1.9
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	9	2.31	0.73	2.6
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	9	2.31	0.73	2.6
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	9	2.24	0.82	2.0
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	9	2.2	0.66	2.1
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	9	2.18	0.68	2.2
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	9	2.13	0.7	1.9
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	9	2.09	0.77	1.8
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	9	2.09	0.77	1.8
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	9	2.03	0.69	1.9
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	9	1.99	0.63	1.9

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	9	1.98	1.1	1.5
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	9	1.89	0.59	1.8
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	9	1.82	0.69	1.7
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	9	1.69	0.5	1.7
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	8	3.64	1.31	3.45
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	8	3.19	1.07	2.75
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	8	2.96	2.32	1.85
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	8	2.96	2.32	1.85
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	8	2.95	0.7	3.1
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	8	2.95	0.7	3.1
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	8	2.94	1.0	2.75
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	8	2.78	1.41	2.6
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	8	2.69	0.68	2.55
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	8	2.66	1.02	2.55
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	8	2.58	1.02	2.55
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	8	2.56	0.79	2.8
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	8	2.45	1.21	2.2
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	8	2.41	0.45	2.4
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	8	2.4	1.02	2.15
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	8	2.39	0.71	2.55
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	8	2.38	0.89	1.95
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	8	2.36	1.26	2.3
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	8	2.35	1.13	2.15
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	8	2.34	1.17	1.9
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	8	2.33	0.87	2.1
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	8	2.33	0.87	2.1
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	8	2.31	0.86	1.95
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	8	2.26	0.9	1.9
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	8	2.2	0.88	1.75
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	8	2.17	0.57	2.35
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	8	2.17	0.61	2.35
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	8	2.15	1.2	1.6
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	8	2.15	1.1	1.7
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	8	2.11	0.84	1.95
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	8	1.99	0.79	1.6
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	8	1.99	0.74	2.0
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	8	1.98	0.54	2.1
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	8	1.98	0.58	1.85
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	8	1.92	0.83	1.6
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	8	1.89	1.07	1.25
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	8	1.8	0.64	1.7
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	8	1.7	0.49	1.55
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	8	1.69	0.42	1.6
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	8	1.69	0.69	1.45
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	8	1.61	0.31	1.75
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	8	1.61	0.31	1.75
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	8	1.6	0.37	1.6
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	8	1.6	0.37	1.6
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	8	1.51	0.37	1.4
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	8	1.46	0.43	1.25
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	8	1.42	0.32	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	7	3.79	1.29	3.8
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	7	3.47	1.83	2.5
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	7	2.9	1.48	2.3
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	7	2.87	1.56	2.6
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	7	2.81	1.35	2.0
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	7	2.74	1.19	2.2
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	7	2.73	1.53	2.1
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	7	2.69	0.98	2.9
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	7	2.47	1.01	2.5
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	7	2.47	1.01	2.5
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	7	2.43	0.91	2.4
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	7	2.37	0.85	2.0
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	7	2.37	0.77	2.0
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	7	2.21	1.2	1.9
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	7	2.13	0.96	1.7
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	7	2.04	0.54	2.3
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	7	2.03	0.64	1.8
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	7	1.99	0.49	2.0
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	7	1.91	0.33	1.8
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	7	1.89	0.58	1.6
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	7	1.86	0.38	1.6
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	7	1.83	0.67	1.8
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	7	1.83	0.67	1.6
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	7	1.8	0.48	1.7
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	7	1.8	0.76	1.5
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	7	1.76	0.44	1.7
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	7	1.71	0.53	1.6
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	7	1.64	0.47	1.5
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	7	1.64	0.81	1.4
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	7	1.57	0.39	1.4
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	7	1.57	0.39	1.4
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	7	1.56	0.5	1.4
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	6	2.83	1.29	2.85
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	6	2.83	1.29	2.85
(1,134)	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	6	2.82	1.34	2.9
(1,284)	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	6	2.78	1.31	2.85
(1,417)	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	1:A:493:ALA:N	6	2.6	0.5	2.75
(1,105)	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	6	2.58	0.32	2.55
(1,113)	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	6	2.52	0.84	2.35
(1,191)	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	6	2.5	0.65	2.5
(1,277)	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	6	2.5	0.8	2.6
(1,381)	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	6	2.43	0.8	2.1
(1,357)	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	6	2.4	0.54	2.25
(1,126)	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	6	2.23	1.0	1.75
(1,356)	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	6	2.23	0.68	2.25
(1,290)	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	6	2.2	1.03	1.75
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	6	2.18	0.55	2.35
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	6	2.18	0.55	2.35
(1,351)	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	1:A:427:PRO:N	6	2.18	0.71	2.0
(1,398)	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	6	2.18	1.03	2.1
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	6	2.12	1.42	1.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	6	2.12	1.42	1.65
(1,52)	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	6	2.03	0.7	2.0
(1,86)	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	6	2.03	0.55	2.15
(1,141)	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	6	2.02	0.65	1.85
(1,173)	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	6	2.02	1.01	1.7
(1,380)	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	6	2.02	0.36	2.05
(1,187)	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	6	1.87	0.69	1.7
(1,88)	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	6	1.83	0.63	1.55
(1,203)	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	6	1.77	0.26	1.8
(1,377)	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	6	1.73	0.34	1.7
(1,313)	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	1:A:368:SER:N	6	1.7	0.47	1.6
(1,198)	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	6	1.7	0.22	1.7
(1,192)	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	6	1.63	0.26	1.7
(1,139)	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	6	1.6	0.28	1.6
(1,101)	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	6	1.45	0.35	1.3
(1,93)	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	6	1.43	0.27	1.3
(1,261)	1:A:315:PRO:N	1:A:315:PRO:CA	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	6	1.43	0.33	1.4
(1,320)	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	5	3.22	1.11	3.8
(1,333)	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	5	3.14	1.21	3.3
(1,263)	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	5	3.12	1.43	2.4
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	5	2.8	1.31	2.7
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	5	2.8	1.31	2.7
(1,172)	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	5	2.64	0.36	2.6
(1,45)	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	5	2.44	0.68	2.5
(1,301)	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	5	2.26	1.03	1.8
(1,378)	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	1:A:454:TYR:N	5	2.16	0.99	1.7
(1,406)	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	5	2.16	1.02	2.0
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	5	2.16	0.8	2.5
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	5	2.16	0.8	2.5
(1,53)	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	5	2.04	0.68	2.0
(1,259)	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	5	1.92	0.76	1.9
(1,287)	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	5	1.92	0.48	2.2
(1,100)	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	5	1.88	0.44	1.8
(1,164)	1:A:451:ILE:C	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	5	1.86	0.33	1.9
(1,262)	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	5	1.8	0.43	1.9
(1,79)	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	5	1.76	0.48	1.7
(1,369)	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	1:A:445:GLY:N	5	1.42	0.26	1.4
(1,310)	1:A:364:THR:N	1:A:364:THR:CA	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	5	1.26	0.14	1.3
(1,122)	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	4	2.95	0.98	3.15
(1,396)	1:A:471:LEU:N	1:A:471:LEU:CA	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	4	2.78	1.34	2.5
(1,337)	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	4	2.75	0.65	2.8
(1,258)	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	4	2.72	0.79	3.05
(1,355)	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	4	2.62	2.13	1.5
(1,418)	1:A:493:ALA:N	1:A:493:ALA:CA	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	4	2.43	0.66	2.75
(1,248)	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	4	2.32	0.72	2.55
(1,73)	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	4	2.15	0.39	2.15
(1,267)	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	1:A:322:GLY:N	4	2.1	0.5	2.1
(1,330)	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	4	2.1	1.05	1.55
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	4	2.08	0.78	1.75
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	4	2.08	0.78	1.75
(1,142)	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	4	2.03	0.72	1.8

Continued on next page...



Continued from previous page...

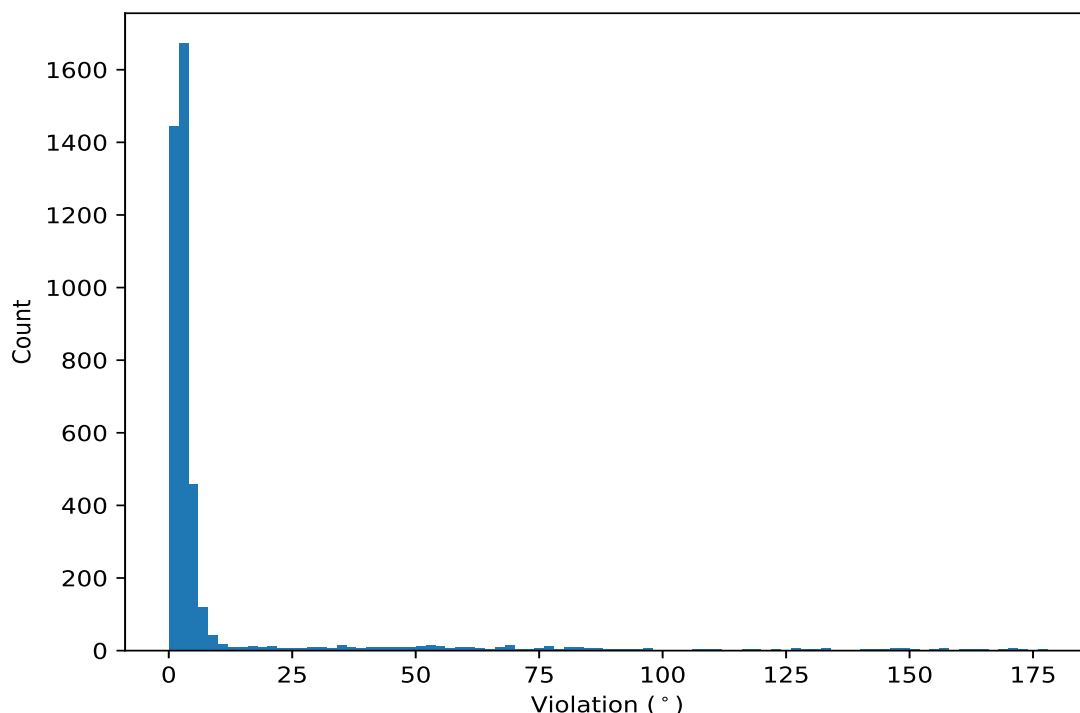
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,136)	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	4	2.02	0.71	2.05
(1,194)	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	4	2.02	0.45	2.15
(1,76)	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	4	1.8	0.1	1.8
(1,163)	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	1:A:451:ILE:CA	1:A:451:ILE:C	4	1.6	0.46	1.35
(1,334)	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	4	1.58	0.43	1.4
(1,389)	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	4	1.55	0.55	1.25
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	4	1.52	0.46	1.35
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	4	1.52	0.46	1.35
(1,116)	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	4	1.38	0.31	1.25
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	4	1.3	0.0	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	4	1.3	0.0	1.3
(1,186)	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	3	3.97	2.6	2.6
(1,311)	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	3	2.3	0.36	2.1
(1,154)	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	1:A:442:TRP:CA	1:A:442:TRP:C	3	2.27	0.69	2.6
(1,195)	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	3	2.27	0.48	2.5
(1,138)	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	1:A:425:THR:CA	1:A:425:THR:C	3	2.2	1.28	1.5
(1,307)	1:A:361:TYR:N	1:A:361:TYR:CA	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	3	2.17	0.74	1.8
(1,89)	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	3	2.13	0.29	2.1
(1,112)	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	3	1.93	0.54	1.6
(1,92)	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	3	1.93	0.54	2.1
(1,379)	1:A:454:TYR:N	1:A:454:TYR:CA	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	3	1.87	0.33	1.8
(1,144)	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	3	1.83	0.38	2.1
(1,124)	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	3	1.8	0.49	1.8
(1,368)	1:A:443:ALA:N	1:A:443:ALA:CA	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	3	1.8	0.57	1.8
(1,133)	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	3	1.73	0.76	1.3
(1,273)	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	1:A:328:PRO:N	3	1.67	0.29	1.7
(1,412)	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	1:A:488:TYR:N	3	1.6	0.57	1.3
(1,185)	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	3	1.43	0.12	1.4
(1,375)	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	3	1.4	0.22	1.5
(1,159)	1:A:446:VAL:C	1:A:447:LEU:N	1:A:447:LEU:CA	1:A:447:LEU:C	3	1.33	0.17	1.4
(1,161)	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	3	1.13	0.05	1.1
(1,108)	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	2	3.0	0.2	3.0
(1,81)	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	2	1.85	0.75	1.85
(1,145)	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	2	1.8	0.4	1.8
(1,219)	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	2	1.8	0.1	1.8
(1,219)	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	2	1.8	0.1	1.8
(1,14)	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	2	1.75	0.55	1.75
(1,14)	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	2	1.75	0.55	1.75
(1,77)	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	2	1.7	0.2	1.7
(1,200)	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	2	1.65	0.25	1.65
(1,367)	1:A:442:TRP:N	1:A:442:TRP:CA	1:A:442:TRP:C	1:A:443:ALA:N	2	1.65	0.25	1.65
(1,121)	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	2	1.45	0.35	1.45
(1,341)	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	2	1.45	0.05	1.45
(1,252)	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	2	1.4	0.2	1.4
(1,397)	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	2	1.4	0.0	1.4
(1,218)	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	2	1.35	0.15	1.35
(1,218)	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	2	1.35	0.15	1.35
(1,96)	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	1:A:361:TYR:CA	1:A:361:TYR:C	2	1.25	0.15	1.25
(1,413)	1:A:488:TYR:N	1:A:488:TYR:CA	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	2	1.25	0.05	1.25
(1,350)	1:A:425:THR:N	1:A:425:THR:CA	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	2	1.1	0.0	1.1

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

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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	11	176.8
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	17	176.6
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	9	176.5
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	16	175.9
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	8	174.6
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	11	173.7
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	17	173.6
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	14	173.2
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	5	172.9
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	19	172.8
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	18	171.4
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	5	171.3
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	20	170.9
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	19	170.9

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	16	170.7
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	8	170.7
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	6	169.1
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	13	168.2
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	19	168.0
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	5	167.6
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	11	166.4
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	7	165.7
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	2	165.4
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	10	164.6
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1	164.4
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	7	164.3
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	10	163.5
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	3	163.4
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	18	162.5
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	15	161.8
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	6	161.5
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	2	160.9
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	9	160.3
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	4	159.6
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	20	158.8
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	16	157.6
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	17	156.6
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	9	156.6
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	11	156.2
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	3	156.0
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	11	156.0
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	12	155.5
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1	154.8
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	7	154.5
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	3	153.7
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	15	151.8
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	11	150.8
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	5	150.4
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	2	149.8
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	20	149.5
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	4	149.2
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	17	149.0
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	3	148.5
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	3	148.0
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	12	148.0
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	15	147.8
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	5	147.1
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	15	146.9
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	19	146.5
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	20	146.1
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	15	146.1
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	9	145.5
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	13	145.4
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	4	145.3
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	12	145.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	13	144.1
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	9	143.8
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	10	143.5
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	11	142.1
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	20	141.6
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	6	141.2
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	17	140.2
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	19	138.3
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	6	138.0
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	16	137.0
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	8	136.6
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	13	135.6
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	18	133.9
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	3	133.6
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	13	133.0
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	15	133.0
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	16	132.4
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	5	132.4
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	3	131.3
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	17	131.2
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	19	131.1
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	10	129.4
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	6	129.4
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	13	128.3
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	17	128.2
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	14	127.1
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	7	126.7
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	17	126.2
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	15	126.2
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	16	126.1
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	20	126.0
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	12	125.8
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	8	125.2
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	10	122.8
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	15	122.5
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	11	122.5
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	9	122.0
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	6	121.6
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	4	121.0
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	16	119.2
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	12	118.8
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1	118.5
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	10	118.1
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	17	117.7
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	15	117.5
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	18	117.4
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	15	116.6
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	8	116.4
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	16	114.7
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	6	114.3
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	17	113.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	11	112.8
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	5	111.4
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	14	111.1
(1,30)	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	2	111.1
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	17	109.9
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	13	109.5
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	13	108.7
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	11	108.6
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	14	108.0
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	4	106.9
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	8	106.1
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	18	106.0
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	10	103.0
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	18	102.0
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	8	101.7
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	7	101.3
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	10	99.8
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	8	98.8
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1	96.8
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	3	96.6
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	15	96.5
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	5	96.3
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	2	96.2
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	3	96.0
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	14	95.1
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	14	94.8
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	13	94.7
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	19	93.6
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	15	93.4
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	4	93.4
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	7	92.8
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	4	92.1
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	4	91.7
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1	90.4
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	17	90.0
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	10	90.0
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1	89.0
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	9	88.6
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	4	88.6
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1	87.8
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	9	87.6
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	15	87.6
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	14	87.5
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	7	87.0
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	8	86.2
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	8	85.8
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	8	85.1
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	19	84.7
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	14	84.2
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	11	84.2
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	6	84.0

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	12	83.9
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	20	83.5
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	16	83.4
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	8	83.1
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	11	83.1
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	5	83.0
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	5	82.8
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	8	82.5
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	20	82.3
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	12	82.1
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	3	81.9
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	3	81.6
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1	81.3
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	13	81.3
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	20	81.3
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	2	81.3
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	16	81.3
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1	81.1
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	16	80.6
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	14	80.4
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	15	78.9
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	2	78.8
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	13	78.2
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	18	78.0
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	3	77.7
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	7	77.7
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	9	77.7
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	9	77.1
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	9	76.7
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	7	76.6
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	2	76.5
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	18	76.5
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	19	76.2
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	3	76.1
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	20	76.1
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	12	76.0
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	12	75.9
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	8	75.8
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	16	75.3
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	10	75.0
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	17	74.7
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	6	74.7
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	9	74.6
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	4	74.0
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	11	73.4
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	1	73.4
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	13	73.1
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	19	72.1
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	6	71.4
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	6	70.8
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	11	70.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	3	70.1
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	19	69.8
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	19	69.5
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	10	69.4
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	2	69.4
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	10	69.3
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	18	68.8
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	5	68.7
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	15	68.6
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	6	68.6
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	13	68.2
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	2	68.1
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	14	68.1
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	10	68.0
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	5	68.0
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1	67.8
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	6	67.5
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	4	67.2
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	4	67.2
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	3	66.9
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	14	66.6
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	7	66.5
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	16	66.3
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	7	66.2
(1,4)	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	12	65.4
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	7	65.3
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	10	64.8
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	3	64.6
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	20	64.6
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	6	63.8
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	9	63.5
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	20	63.3
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	12	63.1
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	12	63.0
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	6	62.8
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	17	62.0
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	5	61.8
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	5	61.7
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	9	61.3
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	4	61.3
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	17	61.3
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	18	61.2
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	17	61.1
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	20	60.9
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	7	60.7
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	14	59.8
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	5	59.4
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	16	59.2
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	20	59.1
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1	58.9
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	11	58.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	18	58.6
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	12	58.4
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	8	58.4
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	7	58.4
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	15	58.1
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	19	57.6
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	8	57.5
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	19	57.2
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	7	57.1
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	10	57.1
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	3	56.4
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	10	56.3
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	6	55.9
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	19	55.9
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	4	55.7
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	10	55.6
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	5	55.2
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	20	55.2
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	4	54.9
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	16	54.7
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	4	54.4
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	17	54.3
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	1	54.0
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	19	54.0
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	14	53.9
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	2	53.7
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	6	53.4
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	15	53.3
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	19	53.1
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	19	53.1
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	16	52.8
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	5	52.7
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	7	52.7
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	14	52.6
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	8	52.6
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	17	52.6
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	11	52.4
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	19	52.0
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	16	51.9
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	2	51.8
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	18	51.7
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	11	51.6
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	9	51.5
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	14	51.5
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	15	51.2
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	4	50.8
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	18	50.8
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	16	50.1
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1	50.0
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	18	50.0
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	18	49.7

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	11	49.7
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	17	49.6
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	9	49.5
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	2	49.2
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	8	49.1
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	12	49.1
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	11	48.9
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1	48.3
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	18	48.2
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1	48.1
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	3	47.7
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	10	47.6
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	12	47.4
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	9	47.2
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	15	47.2
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	3	46.9
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	10	46.7
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	20	46.6
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	18	46.2
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	17	45.9
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	3	45.8
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	14	45.6
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1	45.4
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	9	45.3
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1	45.1
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	3	44.5
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	9	44.5
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	12	44.4
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	8	44.4
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	20	43.6
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	15	43.5
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	18	43.4
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	7	43.2
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	12	43.0
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	15	42.7
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	9	42.7
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	11	42.2
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	5	42.2
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	16	42.1
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	5	41.9
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	13	41.9
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	19	41.9
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	20	41.6
(1,237)	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1:A:531:LYS:N	16	41.3
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	7	41.1
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	18	40.5
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	11	40.4
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	15	40.1
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	11	39.5
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	7	39.5
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1	39.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	10	39.2
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	20	38.3
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	13	38.3
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	7	38.2
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	4	38.2
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	18	37.9
(1,27)	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	8	37.5
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	8	37.5
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	18	37.4
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	15	37.1
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	13	36.5
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	5	36.5
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	8	36.3
(1,8)	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	13	36.0
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	6	35.9
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	20	35.9
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	2	35.8
(1,235)	1:A:528:GLU:N	1:A:528:GLU:CA	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	2	35.4
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	13	35.4
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	17	35.4
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	9	35.2
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	20	35.2
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	20	34.9
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	19	34.4
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	9	34.4
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	14	34.4
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	3	34.3
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	4	34.3
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	19	33.8
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	5	33.5
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	13	33.3
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	11	32.7
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	15	32.4
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	18	32.0
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	7	31.8
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	16	31.8
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	2	31.8
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	19	31.7
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	12	31.3
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	17	31.2
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	17	31.2
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	16	30.8
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	8	30.5
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	11	30.3
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	14	29.8
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	7	29.4
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	15	28.8
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	6	28.7
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	13	28.6
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1	28.6
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	14	28.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	3	28.3
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	17	28.2
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	6	27.7
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	6	27.2
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	6	27.0
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	14	27.0
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	17	26.5
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1	26.2
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	18	26.2
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	2	25.7
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	18	25.2
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	2	25.2
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	8	24.9
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	6	24.5
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	6	24.4
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	7	24.4
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	16	23.9
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	12	23.6
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1	23.1
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	13	22.8
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	13	22.7
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	13	22.7
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	12	22.3
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	19	22.3
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	7	21.9
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	18	21.9
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	4	21.8
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	11	21.8
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	16	21.8
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	15	21.7
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	2	21.7
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	6	21.1
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	6	20.9
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	4	20.7
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	11	20.5
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	10	20.3
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	2	20.0
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	5	19.8
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	10	19.8
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	19	19.7
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	19	19.5
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	17	19.1
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	17	18.6
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	5	18.5
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	5	18.5
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	7	18.3
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	18	17.8
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	16	17.6
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	8	17.5
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	16	17.4
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	13	17.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	9	17.0
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	12	16.9
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1	16.7
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	2	16.6
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	2	16.3
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	12	16.2
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	14	16.0
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	10	15.9
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	10	15.5
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	10	15.1
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	17	15.0
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	13	14.8
(1,32)	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	12	14.6
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	12	14.5
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	4	14.4
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	10	14.2
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	9	14.1
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	4	13.8
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	12	13.6
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	20	13.5
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	18	12.5
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	2	12.3
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	17	12.2
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	8	12.2
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	18	12.2
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	13	12.1
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	5	12.0
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	20	11.9
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1	11.7
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	16	11.5
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1	11.3
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	10	11.3
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	14	11.2
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	20	11.2
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	11	11.1
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	2	10.8
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	9	10.4
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	13	10.4
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	13	10.4
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	2	10.3
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	10	10.3
(1,238)	1:A:531:LYS:N	1:A:531:LYS:CA	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	20	10.3
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	3	10.1
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	5	10.0
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	3	9.8
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	5	9.7
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	5	9.7
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	15	9.6
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	8	9.6
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1	9.5
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	3	9.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	4	9.3
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	18	9.2
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	3	9.2
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	5	9.1
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	5	9.1
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	11	9.1
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	4	9.0
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	1	8.9
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	1	8.9
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	2	8.9
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	19	8.9
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	20	8.9
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	20	8.9
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	12	8.7
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	12	8.7
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	4	8.7
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	8	8.6
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	8	8.5
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	19	8.5
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	9	8.5
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	7	8.5
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	14	8.5
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	14	8.5
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	12	8.5
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	18	8.3
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	20	8.2
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	15	8.2
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1	8.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	18	8.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	18	8.2
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	5	8.1
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	10	8.1
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	11	8.1
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	6	8.0
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	5	8.0
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	10	7.9
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	18	7.9
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	18	7.9
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	11	7.8
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	4	7.8
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	5	7.8
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	5	7.8
(1,239)	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	1:A:533:GLY:N	7	7.7
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	19	7.6
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	15	7.6
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	7	7.6
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	10	7.6
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	15	7.6
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	15	7.6
(1,186)	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	15	7.6
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	3	7.5

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	3	7.5
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	13	7.5
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	3	7.4
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	19	7.4
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	19	7.4
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	6	7.4
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	11	7.3
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	10	7.3
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	19	7.3
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	9	7.3
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	6	7.3
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	2	7.2
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	8	7.2
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	8	7.2
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	12	7.2
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	14	7.2
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	15	7.2
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	16	7.2
(1,26)	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1	7.2
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	17	7.2
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	10	7.1
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	15	7.1
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	2	7.1
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	2	7.1
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	19	7.1
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	15	7.1
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	10	7.1
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	10	7.1
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	5	7.0
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	15	7.0
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	4	7.0
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	2	7.0
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	17	7.0
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1	7.0
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	1	7.0
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	1	6.9
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	12	6.9
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	19	6.9
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	11	6.8
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	16	6.8
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	3	6.8
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	15	6.8
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	4	6.7
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	16	6.7
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	15	6.7
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	13	6.7
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	4	6.7
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	20	6.7
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	2	6.6
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	2	6.6
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	7	6.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	7	6.6
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	9	6.6
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	12	6.6
(1,228)	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	7	6.6
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	14	6.6
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	14	6.6
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	14	6.6
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	15	6.6
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	6	6.6
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	10	6.5
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	14	6.5
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	3	6.5
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	13	6.5
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	17	6.5
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	20	6.5
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	16	6.5
(1,24)	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	14	6.5
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	6	6.5
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	6	6.5
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1	6.4
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	1	6.4
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	14	6.4
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	10	6.3
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	6	6.3
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	14	6.3
(1,355)	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1	6.3
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	9	6.3
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	17	6.3
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	12	6.3
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	19	6.2
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	8	6.2
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	2	6.2
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	9	6.2
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	19	6.1
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	15	6.1
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	11	6.1
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	15	6.1
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	5	6.1
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	13	6.1
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	11	6.1
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	11	6.1
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	19	6.1
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	5	6.0
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	13	6.0
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	13	6.0
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	6	6.0
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	3	6.0
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	12	6.0
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	5	6.0
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	9	6.0
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	9	6.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	13	6.0
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	3	5.9
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	14	5.9
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	20	5.9
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	19	5.9
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1	5.9
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	4	5.9
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	6	5.9
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	8	5.9
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	20	5.9
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	12	5.9
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	3	5.9
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	2	5.9
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	4	5.9
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	11	5.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	11	5.8
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	20	5.8
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	18	5.8
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	13	5.8
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	1	5.8
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	5	5.8
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	4	5.8
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	8	5.8
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	10	5.8
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	2	5.8
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	12	5.8
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	10	5.8
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	10	5.8
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	10	5.8
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1	5.8
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1	5.8
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	10	5.8
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	9	5.8
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	13	5.7
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	14	5.7
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	7	5.7
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	2	5.7
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	3	5.7
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	3	5.7
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	3	5.7
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	5	5.7
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	10	5.7
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	6	5.7
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	14	5.7
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	13	5.6
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	8	5.6
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	5	5.6
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	7	5.6
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	7	5.6
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	13	5.6
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	10	5.6

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	7	5.6
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	9	5.6
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	16	5.6
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	13	5.6
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	13	5.6
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	8	5.6
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	13	5.5
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	19	5.5
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	20	5.5
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	1	5.5
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	19	5.5
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	19	5.5
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	17	5.5
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	1	5.5
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	19	5.5
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	12	5.5
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	3	5.5
(1,263)	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1	5.5
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	6	5.5
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	19	5.5
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	19	5.5
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	18	5.5
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	20	5.4
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	3	5.4
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	4	5.4
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	13	5.4
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	5	5.4
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	9	5.4
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	18	5.4
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	8	5.4
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	11	5.4
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	19	5.4
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	18	5.4
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	8	5.4
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	5	5.4
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	5	5.4
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	6	5.4
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	6	5.4
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1	5.4
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	7	5.3
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	15	5.3
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1	5.3
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	7	5.3
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	10	5.3
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	4	5.3
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	13	5.3
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	15	5.3
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	5	5.3
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	2	5.3
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1	5.3
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	2	5.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	7	5.3
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	7	5.3
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	18	5.2
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	10	5.2
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	12	5.2
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	15	5.2
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	11	5.2
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	17	5.2
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	3	5.2
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	17	5.2
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	3	5.2
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	9	5.2
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	20	5.2
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	20	5.2
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	20	5.2
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	20	5.2
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	8	5.2
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	13	5.2
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	6	5.2
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	8	5.1
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	14	5.1
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	13	5.1
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	19	5.1
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	3	5.1
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	2	5.1
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	3	5.1
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	12	5.1
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	17	5.1
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	17	5.1
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	16	5.1
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	3	5.1
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	16	5.1
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	19	5.1
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	20	5.1
(1,232)	1:A:525:VAL:N	1:A:525:VAL:CA	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	9	5.1
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	20	5.1
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	20	5.1
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	7	5.1
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	19	5.1
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	16	5.1
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	3	5.1
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	10	5.1
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	10	5.0
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	5	5.0
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	15	5.0
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	5	5.0
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	19	5.0
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	20	5.0
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	4	5.0
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	10	5.0
(1,29)	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	1:A:530:GLY:CA	1:A:530:GLY:C	12	5.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	7	5.0
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	14	5.0
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	20	5.0
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	14	5.0
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	20	5.0
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	12	5.0
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	12	5.0
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	15	5.0
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	15	5.0
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	15	5.0
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	2	5.0
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	16	5.0
(1,134)	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	18	5.0
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	19	5.0
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	4	5.0
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	3	5.0
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	3	5.0
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	8	4.9
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	15	4.9
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	9	4.9
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1	4.9
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1	4.9
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	3	4.9
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	20	4.9
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	4	4.9
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	12	4.9
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	12	4.9
(1,396)	1:A:471:LEU:N	1:A:471:LEU:CA	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	13	4.9
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	2	4.9
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1	4.9
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	14	4.9
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	5	4.9
(1,333)	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	20	4.9
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	14	4.9
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	14	4.9
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	3	4.9
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	12	4.9
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	2	4.9
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	9	4.9
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	14	4.9
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	12	4.9
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	18	4.9
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	18	4.9
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1	4.9
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	12	4.9
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	3	4.8
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	16	4.8
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	17	4.8
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	20	4.8
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	6	4.8
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	14	4.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	17	4.8
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	13	4.8
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	2	4.8
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	20	4.8
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	7	4.8
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	8	4.8
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	15	4.8
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	18	4.8
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	12	4.8
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	12	4.8
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	4	4.8
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	4	4.8
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	3	4.8
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	10	4.8
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	19	4.8
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	13	4.8
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	19	4.8
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	13	4.8
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	3	4.8
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	12	4.8
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	8	4.7
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	7	4.7
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	8	4.7
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	12	4.7
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	12	4.7
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	15	4.7
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	19	4.7
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	7	4.7
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	10	4.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	19	4.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	19	4.7
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	2	4.7
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	2	4.7
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	13	4.7
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	13	4.7
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	16	4.7
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	20	4.7
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	7	4.6
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	7	4.6
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	2	4.6
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	20	4.6
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	16	4.6
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	11	4.6
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	19	4.6
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	15	4.6
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	3	4.6
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	6	4.6
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	14	4.6
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	16	4.6
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	12	4.6
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	20	4.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	4	4.6
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	16	4.6
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	6	4.6
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	6	4.6
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	10	4.6
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1	4.6
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	16	4.6
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	4	4.6
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	20	4.5
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	20	4.5
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	10	4.5
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	8	4.5
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	6	4.5
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	19	4.5
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	12	4.5
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	19	4.5
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	16	4.5
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	10	4.5
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	10	4.5
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	13	4.5
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	17	4.5
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	8	4.5
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	7	4.5
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	6	4.5
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	13	4.5
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	19	4.5
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	19	4.5
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	17	4.5
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	14	4.5
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	6	4.5
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	13	4.4
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	11	4.4
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	3	4.4
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	9	4.4
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	4	4.4
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	6	4.4
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	17	4.4
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	3	4.4
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	15	4.4
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	16	4.4
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	12	4.4
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	4	4.4
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	15	4.4
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	16	4.4
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	11	4.4
(1,320)	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	4	4.4
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1	4.4
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	15	4.4
(1,284)	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	15	4.4
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1	4.4
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	16	4.4

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	17	4.4
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	20	4.4
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	20	4.4
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	17	4.4
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	5	4.3
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	6	4.3
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	19	4.3
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	9	4.3
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	15	4.3
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	20	4.3
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	18	4.3
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	1	4.3
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	18	4.3
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	4	4.3
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	2	4.3
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	20	4.3
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	10	4.3
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	18	4.3
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	3	4.3
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	18	4.3
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	13	4.3
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	6	4.3
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	14	4.3
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	12	4.3
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	3	4.3
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	3	4.3
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	3	4.3
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	12	4.3
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	12	4.3
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	3	4.3
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	8	4.3
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	3	4.3
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	20	4.3
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	15	4.2
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	3	4.2
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	13	4.2
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	18	4.2
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	7	4.2
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	10	4.2
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	12	4.2
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1	4.2
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	10	4.2
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	16	4.2
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	5	4.2
(1,398)	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	14	4.2
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	7	4.2
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	10	4.2
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	7	4.2
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	10	4.2
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	19	4.2
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	14	4.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	5	4.2
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	6	4.2
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	16	4.2
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	2	4.2
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	11	4.2
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	6	4.2
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	12	4.2
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	9	4.2
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	8	4.2
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	4	4.2
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	20	4.2
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	20	4.2
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	7	4.2
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	5	4.2
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	14	4.2
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	12	4.2
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	2	4.2
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	8	4.2
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	16	4.2
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	15	4.2
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	6	4.1
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	4	4.1
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	9	4.1
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	2	4.1
(1,406)	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	19	4.1
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	12	4.1
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	9	4.1
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	6	4.1
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	18	4.1
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	15	4.1
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	18	4.1
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	3	4.1
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	18	4.1
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	17	4.1
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	17	4.1
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	12	4.1
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	13	4.1
(1,320)	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	19	4.1
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	10	4.1
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	14	4.1
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	19	4.1
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	12	4.1
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	19	4.1
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	4	4.1
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	8	4.1
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	18	4.1
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	17	4.1
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	3	4.1
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	8	4.1
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	8	4.1
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	3	4.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	7	4.1
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	7	4.1
(1,122)	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	14	4.1
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	5	4.1
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	9	4.0
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	5	4.0
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	8	4.0
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	10	4.0
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	17	4.0
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	4	4.0
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	5	4.0
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1	4.0
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	6	4.0
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	20	4.0
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	4	4.0
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	6	4.0
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	4	4.0
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	11	4.0
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	18	4.0
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	19	4.0
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	4	4.0
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	18	4.0
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	14	4.0
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	19	4.0
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	4	4.0
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	19	4.0
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	17	4.0
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	5	4.0
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	2	4.0
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	8	4.0
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	3	4.0
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	11	4.0
(1,284)	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	17	4.0
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1	4.0
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	2	4.0
(1,263)	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	13	4.0
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	13	4.0
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	16	4.0
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	4	4.0
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1	4.0
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	7	4.0
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1	4.0
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	10	4.0
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	8	4.0
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	11	4.0
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	9	4.0
(1,173)	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	12	4.0
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	16	4.0
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	4	4.0
(1,138)	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	1:A:425:THR:CA	1:A:425:THR:C	8	4.0
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	11	4.0

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	16	4.0
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1	3.9
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	14	3.9
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	19	3.9
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	4	3.9
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	9	3.9
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	12	3.9
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	20	3.9
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	14	3.9
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	3	3.9
(1,333)	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	11	3.9
(1,330)	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	17	3.9
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	2	3.9
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	14	3.9
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	15	3.9
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	7	3.9
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	8	3.9
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	14	3.9
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	16	3.9
(1,290)	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	14	3.9
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	9	3.9
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	18	3.9
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	18	3.9
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	17	3.9
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	11	3.9
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1	3.9
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1	3.9
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	7	3.9
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	7	3.9
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	16	3.9
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	16	3.9
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	6	3.9
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	19	3.9
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	20	3.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	2	3.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	2	3.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	7	3.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	7	3.9
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	9	3.9
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	3	3.9
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	12	3.9
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	13	3.8
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	10	3.8
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	8	3.8
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	11	3.8
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	15	3.8
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	20	3.8
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	18	3.8
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	5	3.8
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	9	3.8
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	19	3.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1	3.8
(1,381)	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	16	3.8
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	18	3.8
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	7	3.8
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	2	3.8
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	5	3.8
(1,320)	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	2	3.8
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	17	3.8
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	10	3.8
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	17	3.8
(1,284)	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	9	3.8
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	20	3.8
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	19	3.8
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	2	3.8
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	18	3.8
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	15	3.8
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	16	3.8
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	6	3.8
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	7	3.8
(1,233)	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	1:A:527:LYS:N	14	3.8
(1,23)	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	13	3.8
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	20	3.8
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	20	3.8
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	7	3.8
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	7	3.8
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	16	3.8
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	15	3.8
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	4	3.8
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	13	3.8
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	17	3.8
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	18	3.8
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	19	3.8
(1,126)	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	17	3.8
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	3	3.8
(1,113)	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	3	3.8
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	18	3.7
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	5	3.7
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	5	3.7
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	20	3.7
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	17	3.7
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	6	3.7
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	6	3.7
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	11	3.7
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	12	3.7
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	2	3.7
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	6	3.7
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	7	3.7
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	7	3.7
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	8	3.7
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	7	3.7
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	1	3.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	14	3.7
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	20	3.7
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	11	3.7
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	11	3.7
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	14	3.7
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	5	3.7
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	17	3.7
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	5	3.7
(1,231)	1:A:524:GLU:N	1:A:524:GLU:CA	1:A:524:GLU:C	1:A:525:VAL:N	20	3.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	13	3.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	13	3.7
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	19	3.7
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	4	3.7
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	14	3.7
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	20	3.7
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	17	3.7
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	12	3.7
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1	3.7
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	19	3.7
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	10	3.7
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	16	3.7
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	15	3.6
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	15	3.6
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	4	3.6
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	20	3.6
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	19	3.6
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	4	3.6
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	8	3.6
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	5	3.6
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	20	3.6
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1	3.6
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	15	3.6
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	6	3.6
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	15	3.6
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	3	3.6
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	11	3.6
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	3	3.6
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	15	3.6
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	10	3.6
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	13	3.6
(1,351)	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	1:A:427:PRO:N	14	3.6
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	11	3.6
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	13	3.6
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	3	3.6
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	12	3.6
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	4	3.6
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	18	3.6
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	8	3.6
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	4	3.6
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	20	3.6
(1,301)	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	12	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	10	3.6
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	10	3.6
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	11	3.6
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	6	3.6
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	13	3.6
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	9	3.6
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	2	3.6
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	14	3.6
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	7	3.6
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	15	3.6
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	11	3.6
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	4	3.6
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	16	3.6
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	16	3.6
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	14	3.6
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	14	3.6
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	8	3.6
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	9	3.6
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	2	3.6
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	2	3.6
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	11	3.6
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	14	3.6
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	15	3.6
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	5	3.6
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	18	3.6
(1,134)	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	20	3.6
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	3	3.6
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	4	3.6
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	3	3.5
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	20	3.5
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	20	3.5
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	17	3.5
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	10	3.5
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	19	3.5
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	9	3.5
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	20	3.5
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	9	3.5
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	10	3.5
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	15	3.5
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	14	3.5
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	3	3.5
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	11	3.5
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	5	3.5
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	13	3.5
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	19	3.5
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	4	3.5
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	10	3.5
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	13	3.5
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	6	3.5
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	15	3.5
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	15	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	3	3.5
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	5	3.5
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	6	3.5
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	6	3.5
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	19	3.5
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	16	3.5
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	6	3.5
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	2	3.5
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	8	3.5
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	3	3.5
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	8	3.5
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	9	3.5
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	13	3.5
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	9	3.5
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	11	3.5
(1,277)	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	18	3.5
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	18	3.5
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	15	3.5
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	9	3.5
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	20	3.5
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	19	3.5
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	2	3.5
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	3	3.5
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	5	3.5
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	20	3.5
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	20	3.5
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	19	3.5
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	19	3.5
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	6	3.5
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	6	3.5
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	17	3.5
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	17	3.5
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	15	3.5
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	15	3.5
(1,191)	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	19	3.5
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	10	3.5
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	15	3.5
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	3	3.5
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	10	3.5
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	19	3.5
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	7	3.5
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	8	3.5
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	11	3.5
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	5	3.5
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	5	3.5
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	3	3.4
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	10	3.4
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	19	3.4
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	17	3.4
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	17	3.4
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	15	3.4

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	14	3.4
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	3	3.4
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	12	3.4
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	15	3.4
(1,45)	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	20	3.4
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	17	3.4
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	7	3.4
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	18	3.4
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	19	3.4
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	20	3.4
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	4	3.4
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	15	3.4
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	9	3.4
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	12	3.4
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	16	3.4
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	14	3.4
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	16	3.4
(1,378)	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	1:A:454:TYR:N	6	3.4
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	10	3.4
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	18	3.4
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	16	3.4
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	5	3.4
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	8	3.4
(1,337)	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	17	3.4
(1,337)	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	19	3.4
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	11	3.4
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	19	3.4
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	12	3.4
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	7	3.4
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	4	3.4
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	19	3.4
(1,301)	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	20	3.4
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	1	3.4
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	16	3.4
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	2	3.4
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	7	3.4
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	1	3.4
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	9	3.4
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	1	3.4
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	11	3.4
(1,258)	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	4	3.4
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	3	3.4
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	7	3.4
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	14	3.4
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	10	3.4
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	11	3.4
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	7	3.4
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	13	3.4
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	18	3.4
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	19	3.4
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	11	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	11	3.4
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	15	3.4
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	15	3.4
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	10	3.4
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	10	3.4
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	6	3.4
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	6	3.4
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	5	3.4
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	9	3.4
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	20	3.4
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	7	3.4
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	10	3.4
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	13	3.4
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	2	3.4
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1	3.4
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	13	3.4
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	20	3.4
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	3	3.4
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	5	3.4
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	13	3.4
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	3	3.4
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	19	3.4
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	3	3.4
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	4	3.4
(1,134)	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	10	3.4
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	9	3.4
(1,126)	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	3	3.4
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	11	3.4
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	15	3.4
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	8	3.4
(1,113)	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1	3.4
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	6	3.4
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	6	3.4
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	19	3.3
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	12	3.3
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	13	3.3
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	12	3.3
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	15	3.3
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	15	3.3
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	5	3.3
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	1	3.3
(1,53)	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	6	3.3
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	10	3.3
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	10	3.3
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	2	3.3
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	16	3.3
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	11	3.3
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	17	3.3
(1,378)	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	1:A:454:TYR:N	10	3.3
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	7	3.3
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	5	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	17	3.3
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	2	3.3
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	13	3.3
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	4	3.3
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	11	3.3
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	7	3.3
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	13	3.3
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	11	3.3
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	12	3.3
(1,333)	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	19	3.3
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	3	3.3
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	4	3.3
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	12	3.3
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	6	3.3
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	4	3.3
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	15	3.3
(1,290)	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	2	3.3
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	5	3.3
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	18	3.3
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	9	3.3
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	2	3.3
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	19	3.3
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	2	3.3
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	17	3.3
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	17	3.3
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	19	3.3
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	19	3.3
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	4	3.3
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	4	3.3
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	6	3.3
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	6	3.3
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	14	3.3
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1	3.3
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	6	3.3
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	6	3.3
(1,187)	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	13	3.3
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	7	3.3
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	8	3.3
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	9	3.3
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	8	3.3
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	8	3.3
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	10	3.3
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	13	3.2
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	16	3.2
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	16	3.2
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	16	3.2
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	14	3.2
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	17	3.2
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	7	3.2
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	3	3.2
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	18	3.2

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,417)	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	1:A:493:ALA:N	11	3.2
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	12	3.2
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1	3.2
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	8	3.2
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	11	3.2
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	14	3.2
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	14	3.2
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	20	3.2
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	10	3.2
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	20	3.2
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	4	3.2
(1,381)	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	9	3.2
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	10	3.2
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	19	3.2
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	4	3.2
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	11	3.2
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	6	3.2
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	15	3.2
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	2	3.2
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	17	3.2
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	18	3.2
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	16	3.2
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	8	3.2
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	13	3.2
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	2	3.2
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	15	3.2
(1,307)	1:A:361:TYR:N	1:A:361:TYR:CA	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	8	3.2
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	4	3.2
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	20	3.2
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	2	3.2
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	5	3.2
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	8	3.2
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	15	3.2
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	2	3.2
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1	3.2
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	4	3.2
(1,277)	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	4	3.2
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	8	3.2
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	10	3.2
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	13	3.2
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	17	3.2
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	11	3.2
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	9	3.2
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	15	3.2
(1,259)	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	12	3.2
(1,258)	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	18	3.2
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	11	3.2
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	8	3.2
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	14	3.2
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	8	3.2
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	19	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	15	3.2
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	15	3.2
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	17	3.2
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	17	3.2
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	12	3.2
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	12	3.2
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	7	3.2
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	6	3.2
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	18	3.2
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	2	3.2
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	6	3.2
(1,172)	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	18	3.2
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	5	3.2
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	18	3.2
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	4	3.2
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	8	3.2
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	3	3.2
(1,142)	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	16	3.2
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	18	3.2
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	9	3.2
(1,122)	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	15	3.2
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	7	3.2
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	2	3.2
(1,111)	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	14	3.2
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	4	3.2
(1,108)	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	16	3.2
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	3	3.2
(1,105)	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1	3.2
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1	3.1
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	3	3.1
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	3	3.1
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1	3.1
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	16	3.1
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	15	3.1
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	14	3.1
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	10	3.1
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	4	3.1
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	18	3.1
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	16	3.1
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	6	3.1
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	16	3.1
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	11	3.1
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	17	3.1
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	3	3.1
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	20	3.1
(1,401)	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	2	3.1
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	18	3.1
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	8	3.1
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	6	3.1
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	2	3.1
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	12	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,357)	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	7	3.1
(1,357)	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	11	3.1
(1,356)	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	5	3.1
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	3	3.1
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	12	3.1
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	16	3.1
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	10	3.1
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	8	3.1
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	19	3.1
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	4	3.1
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	20	3.1
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	3	3.1
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	9	3.1
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	18	3.1
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	2	3.1
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	9	3.1
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	15	3.1
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	3	3.1
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	11	3.1
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	6	3.1
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	11	3.1
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	3	3.1
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	18	3.1
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	4	3.1
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	15	3.1
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	8	3.1
(1,277)	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	13	3.1
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	14	3.1
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	13	3.1
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	16	3.1
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	4	3.1
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	8	3.1
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	3	3.1
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1	3.1
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1	3.1
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1	3.1
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1	3.1
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	9	3.1
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	9	3.1
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	3	3.1
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	3	3.1
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	2	3.1
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	2	3.1
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	10	3.1
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	10	3.1
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	18	3.1
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	18	3.1
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	3	3.1
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	20	3.1
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	19	3.1
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	15	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	12	3.1
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	12	3.1
(1,141)	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	15	3.1
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	17	3.1
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	14	3.1
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	15	3.1
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	5	3.1
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	14	3.1
(1,122)	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	3	3.1
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	6	3.1
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	8	3.1
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	5	3.1
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	10	3.1
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	2	3.1
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	7	3.0
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	8	3.0
(1,88)	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	9	3.0
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	9	3.0
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	12	3.0
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	2	3.0
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	19	3.0
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	20	3.0
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	12	3.0
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	17	3.0
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1	3.0
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	6	3.0
(1,417)	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	1:A:493:ALA:N	19	3.0
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	20	3.0
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	15	3.0
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	13	3.0
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	15	3.0
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	6	3.0
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	15	3.0
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	6	3.0
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	6	3.0
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	10	3.0
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	18	3.0
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	3	3.0
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	9	3.0
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	5	3.0
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	9	3.0
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	14	3.0
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	18	3.0
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	8	3.0
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	13	3.0
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	13	3.0
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	10	3.0
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	17	3.0
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	14	3.0
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	5	3.0
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	18	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	19	3.0
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	19	3.0
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	14	3.0
(1,248)	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	11	3.0
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	9	3.0
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	13	3.0
(1,240)	1:A:533:GLY:N	1:A:533:GLY:CA	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	10	3.0
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	3	3.0
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	3	3.0
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	5	3.0
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	5	3.0
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	16	3.0
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	16	3.0
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	11	3.0
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	9	3.0
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	7	3.0
(1,191)	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	3	3.0
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	9	3.0
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	5	3.0
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	17	3.0
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	13	3.0
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	10	3.0
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	2	3.0
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	11	3.0
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1	3.0
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	12	3.0
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	20	3.0
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	2	3.0
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	18	3.0
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	14	3.0
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	18	3.0
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	18	3.0
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	6	2.9
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	15	2.9
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	2	2.9
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	7	2.9
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	15	2.9
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	6	2.9
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	13	2.9
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	9	2.9
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	9	2.9
(1,52)	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	2	2.9
(1,52)	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	16	2.9
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	18	2.9
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	18	2.9
(1,45)	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	8	2.9
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	20	2.9
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	5	2.9
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	15	2.9
(1,418)	1:A:493:ALA:N	1:A:493:ALA:CA	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1	2.9
(1,418)	1:A:493:ALA:N	1:A:493:ALA:CA	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	13	2.9

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,417)	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	1:A:493:ALA:N	13	2.9
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	16	2.9
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	11	2.9
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	16	2.9
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	5	2.9
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	19	2.9
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	15	2.9
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	20	2.9
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	13	2.9
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	11	2.9
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	12	2.9
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	17	2.9
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	16	2.9
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	13	2.9
(1,33)	1:A:533:GLY:C	1:A:534:VAL:N	1:A:534:VAL:CA	1:A:534:VAL:C	3	2.9
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	4	2.9
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	1	2.9
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	13	2.9
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	18	2.9
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	17	2.9
(1,31)	1:A:531:LYS:C	1:A:532:GLN:N	1:A:532:GLN:CA	1:A:532:GLN:C	4	2.9
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	15	2.9
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	11	2.9
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	7	2.9
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	13	2.9
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	8	2.9
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	1	2.9
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	2	2.9
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	10	2.9
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	13	2.9
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	13	2.9
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	2	2.9
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	4	2.9
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1	2.9
(1,258)	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	12	2.9
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	14	2.9
(1,248)	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	10	2.9
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	4	2.9
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	14	2.9
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	6	2.9
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	18	2.9
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	19	2.9
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	8	2.9
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	8	2.9
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	6	2.9
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	6	2.9
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	5	2.9
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	5	2.9
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	18	2.9
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	18	2.9
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	20	2.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	20	2.9
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	12	2.9
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	1	2.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	15	2.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	15	2.9
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	3	2.9
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	4	2.9
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	5	2.9
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	13	2.9
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	8	2.9
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	16	2.9
(1,154)	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	1:A:442:TRP:CA	1:A:442:TRP:C	20	2.9
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	7	2.9
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	11	2.9
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	4	2.9
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	15	2.9
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	16	2.9
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	2	2.9
(1,136)	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	5	2.9
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	5	2.9
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	17	2.9
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	7	2.9
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	13	2.9
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1	2.9
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	17	2.9
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	3	2.9
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	16	2.9
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	12	2.8
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	5	2.8
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	13	2.8
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	18	2.8
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	19	2.8
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	5	2.8
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	12	2.8
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	8	2.8
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	16	2.8
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	3	2.8
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	9	2.8
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	4	2.8
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	9	2.8
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	14	2.8
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	7	2.8
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	8	2.8
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	20	2.8
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	14	2.8
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	3	2.8
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	6	2.8
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	10	2.8
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	5	2.8
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	7	2.8
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	3	2.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	5	2.8
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	19	2.8
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	10	2.8
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	2	2.8
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	16	2.8
(1,356)	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	4	2.8
(1,356)	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	15	2.8
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	15	2.8
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	11	2.8
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	13	2.8
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	13	2.8
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	6	2.8
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1	2.8
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	13	2.8
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	14	2.8
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	11	2.8
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	17	2.8
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	3	2.8
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	12	2.8
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	5	2.8
(1,311)	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	7	2.8
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	5	2.8
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	13	2.8
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	12	2.8
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	12	2.8
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	19	2.8
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	19	2.8
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	13	2.8
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	5	2.8
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	15	2.8
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	16	2.8
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	8	2.8
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	10	2.8
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	4	2.8
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	16	2.8
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	11	2.8
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	12	2.8
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	11	2.8
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	4	2.8
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	3	2.8
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	15	2.8
(1,25)	1:A:525:VAL:C	1:A:526:GLU:N	1:A:526:GLU:CA	1:A:526:GLU:C	19	2.8
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	13	2.8
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	7	2.8
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	6	2.8
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	6	2.8
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	13	2.8
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	13	2.8
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	10	2.8
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	10	2.8
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	3	2.8

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	3	2.8
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	13	2.8
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	16	2.8
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	5	2.8
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	17	2.8
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	9	2.8
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	9	2.8
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	6	2.8
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	17	2.8
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	7	2.8
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	18	2.8
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	14	2.8
(1,172)	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	9	2.8
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1	2.8
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	4	2.8
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	15	2.8
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	7	2.8
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	18	2.8
(1,133)	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	10	2.8
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	11	2.8
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	5	2.8
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	3	2.8
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	11	2.8
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	9	2.8
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	15	2.8
(1,108)	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	17	2.8
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	14	2.8
(1,86)	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	3	2.7
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	14	2.7
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	17	2.7
(1,73)	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	18	2.7
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	16	2.7
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	5	2.7
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	19	2.7
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	19	2.7
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	20	2.7
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	4	2.7
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	17	2.7
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	2	2.7
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	19	2.7
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	9	2.7
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	17	2.7
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	15	2.7
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	8	2.7
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	9	2.7
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	14	2.7
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	3	2.7
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	20	2.7
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	14	2.7
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	16	2.7
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	14	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	4	2.7
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	10	2.7
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	4	2.7
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	10	2.7
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	8	2.7
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	18	2.7
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	9	2.7
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	11	2.7
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	18	2.7
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	10	2.7
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	7	2.7
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	20	2.7
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	18	2.7
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	2	2.7
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1	2.7
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	13	2.7
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	8	2.7
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1	2.7
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	6	2.7
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	16	2.7
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	11	2.7
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	4	2.7
(1,28)	1:A:528:GLU:C	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	16	2.7
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	8	2.7
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	17	2.7
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	6	2.7
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	10	2.7
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	19	2.7
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1	2.7
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	11	2.7
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	19	2.7
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	14	2.7
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	14	2.7
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	2	2.7
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	2	2.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	7	2.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	7	2.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	10	2.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	10	2.7
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1	2.7
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1	2.7
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	12	2.7
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	12	2.7
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	7	2.7
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	7	2.7
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	7	2.7
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	7	2.7
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	2	2.7
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	11	2.7
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	13	2.7
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	12	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	17	2.7
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	6	2.7
(1,195)	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	5	2.7
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	7	2.7
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	4	2.7
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	4	2.7
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	18	2.7
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	18	2.7
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	11	2.7
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	13	2.7
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	1	2.7
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	9	2.7
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	15	2.7
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	6	2.7
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	5	2.7
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	6	2.7
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	5	2.7
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	13	2.7
(1,112)	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	11	2.7
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	19	2.7
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	20	2.7
(1,105)	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	9	2.7
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	17	2.6
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	11	2.6
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	2	2.6
(1,81)	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	18	2.6
(1,79)	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	19	2.6
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	8	2.6
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	18	2.6
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	18	2.6
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	12	2.6
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	19	2.6
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	18	2.6
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	12	2.6
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	14	2.6
(1,418)	1:A:493:ALA:N	1:A:493:ALA:CA	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	12	2.6
(1,417)	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	1:A:493:ALA:N	12	2.6
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	1	2.6
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	8	2.6
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	7	2.6
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1	2.6
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	2	2.6
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	19	2.6
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	8	2.6
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	15	2.6
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	16	2.6
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	6	2.6
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	12	2.6
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	15	2.6
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	20	2.6
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	20	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	19	2.6
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	19	2.6
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	5	2.6
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	6	2.6
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	10	2.6
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	7	2.6
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	8	2.6
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	10	2.6
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	16	2.6
(1,313)	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	1:A:368:SER:N	17	2.6
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	19	2.6
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	18	2.6
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	18	2.6
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	4	2.6
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1	2.6
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	2	2.6
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	13	2.6
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	5	2.6
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	20	2.6
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	15	2.6
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	15	2.6
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	18	2.6
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	12	2.6
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	12	2.6
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	6	2.6
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	6	2.6
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	19	2.6
(1,267)	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	1:A:322:GLY:N	3	2.6
(1,267)	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	1:A:322:GLY:N	13	2.6
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	17	2.6
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	9	2.6
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	3	2.6
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	3	2.6
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	18	2.6
(1,242)	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	17	2.6
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	9	2.6
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	9	2.6
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	17	2.6
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	17	2.6
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	17	2.6
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	17	2.6
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1	2.6
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	1	2.6
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	16	2.6
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	16	2.6
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	7	2.6
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	2	2.6
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	9	2.6
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	10	2.6
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	8	2.6
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	17	2.6
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	11	2.6
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	11	2.6
(1,186)	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	19	2.6
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	3	2.6
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	7	2.6
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	15	2.6
(1,172)	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	3	2.6
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	2	2.6
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	17	2.6
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	19	2.6
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	15	2.6
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	15	2.6
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	1	2.6
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	11	2.6
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	13	2.6
(1,154)	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	1:A:442:TRP:CA	1:A:442:TRP:C	6	2.6
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	5	2.6
(1,141)	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	14	2.6
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	15	2.6
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	10	2.6
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	10	2.6
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	16	2.6
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	20	2.6
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	10	2.6
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	2	2.6
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	6	2.6
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	16	2.6
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	19	2.6
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	10	2.6
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	17	2.6
(1,105)	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	11	2.6
(1,100)	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	2	2.6
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	8	2.5
(1,92)	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	16	2.5
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	13	2.5
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	18	2.5
(1,89)	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	8	2.5
(1,86)	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	9	2.5
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	11	2.5
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	13	2.5
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	9	2.5
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	3	2.5
(1,45)	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	13	2.5
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	16	2.5
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	16	2.5
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	7	2.5
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	19	2.5
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	18	2.5
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	15	2.5
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	18	2.5

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	12	2.5
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	10	2.5
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	19	2.5
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	13	2.5
(1,396)	1:A:471:LEU:N	1:A:471:LEU:CA	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	3	2.5
(1,396)	1:A:471:LEU:N	1:A:471:LEU:CA	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	6	2.5
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	3	2.5
(1,389)	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	5	2.5
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	8	2.5
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	10	2.5
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	18	2.5
(1,380)	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	5	2.5
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	3	2.5
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	19	2.5
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	16	2.5
(1,368)	1:A:443:ALA:N	1:A:443:ALA:CA	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	20	2.5
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	9	2.5
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	9	2.5
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	18	2.5
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	18	2.5
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	12	2.5
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	5	2.5
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	15	2.5
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	6	2.5
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	1	2.5
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	20	2.5
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	4	2.5
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	11	2.5
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	10	2.5
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	13	2.5
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	4	2.5
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	7	2.5
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	17	2.5
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	16	2.5
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	17	2.5
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	4	2.5
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	19	2.5
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	19	2.5
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	8	2.5
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	8	2.5
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	13	2.5
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	13	2.5
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	16	2.5
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	16	2.5
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	19	2.5
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	20	2.5
(1,195)	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	12	2.5
(1,194)	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	5	2.5
(1,191)	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	6	2.5
(1,191)	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	16	2.5
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	3	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	6	2.5
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	16	2.5
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	2	2.5
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	12	2.5
(1,172)	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	11	2.5
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	9	2.5
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	15	2.5
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	3	2.5
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	20	2.5
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	14	2.5
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	9	2.5
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	11	2.5
(1,136)	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	10	2.5
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	7	2.5
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	16	2.5
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	12	2.5
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	4	2.5
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	13	2.5
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	16	2.5
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	9	2.5
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	7	2.5
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	2	2.5
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1	2.5
(1,105)	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	2	2.5
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	4	2.4
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	11	2.4
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	18	2.4
(1,86)	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	10	2.4
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	14	2.4
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	2	2.4
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	13	2.4
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	17	2.4
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1	2.4
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	9	2.4
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	19	2.4
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	2	2.4
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	13	2.4
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	13	2.4
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	16	2.4
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	9	2.4
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	14	2.4
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	11	2.4
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	6	2.4
(1,412)	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	1:A:488:TYR:N	18	2.4
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	4	2.4
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	12	2.4
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	10	2.4
(1,398)	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	9	2.4
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	10	2.4
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	11	2.4
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	10	2.4

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	10	2.4
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	2	2.4
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	14	2.4
(1,362)	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	3	2.4
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	17	2.4
(1,357)	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	6	2.4
(1,351)	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	1:A:427:PRO:N	1	2.4
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	11	2.4
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1	2.4
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	14	2.4
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	7	2.4
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	20	2.4
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	5	2.4
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	9	2.4
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	14	2.4
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	20	2.4
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	5	2.4
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	11	2.4
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	3	2.4
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	6	2.4
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	3	2.4
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	1	2.4
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	9	2.4
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	2	2.4
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	12	2.4
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	3	2.4
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	18	2.4
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	13	2.4
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	14	2.4
(1,287)	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	20	2.4
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	14	2.4
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	8	2.4
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	19	2.4
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	4	2.4
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	15	2.4
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	4	2.4
(1,263)	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	2	2.4
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	20	2.4
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1	2.4
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	13	2.4
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	17	2.4
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	2	2.4
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	2	2.4
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1	2.4
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1	2.4
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	10	2.4
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	10	2.4
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	17	2.4
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	14	2.4
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	11	2.4
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	14	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	14	2.4
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	11	2.4
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	12	2.4
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	8	2.4
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	17	2.4
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	16	2.4
(1,173)	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	19	2.4
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	6	2.4
(1,163)	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	1:A:451:ILE:CA	1:A:451:ILE:C	18	2.4
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1	2.4
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	12	2.4
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	5	2.4
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	8	2.4
(1,134)	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	7	2.4
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	4	2.4
(1,124)	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	6	2.4
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	11	2.4
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	3	2.4
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	20	2.4
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	9	2.4
(1,113)	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	13	2.4
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	8	2.4
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	19	2.4
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	20	2.4
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	2	2.4
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	2	2.4
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	10	2.4
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	10	2.4
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	5	2.3
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	8	2.3
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	8	2.3
(1,88)	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	6	2.3
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	10	2.3
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	18	2.3
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	2	2.3
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	18	2.3
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	9	2.3
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	10	2.3
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	8	2.3
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	2	2.3
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	5	2.3
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	18	2.3
(1,398)	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	8	2.3
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	15	2.3
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	8	2.3
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	19	2.3
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	18	2.3
(1,380)	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	16	2.3
(1,379)	1:A:454:TYR:N	1:A:454:TYR:CA	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	15	2.3
(1,377)	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	13	2.3
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	9	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	7	2.3
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	15	2.3
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	17	2.3
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1	2.3
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1	2.3
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	15	2.3
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	16	2.3
(1,334)	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	10	2.3
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	17	2.3
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	9	2.3
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	16	2.3
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1	2.3
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	2	2.3
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	17	2.3
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	4	2.3
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	9	2.3
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	10	2.3
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	15	2.3
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	15	2.3
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	15	2.3
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	20	2.3
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	10	2.3
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	18	2.3
(1,287)	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	7	2.3
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	13	2.3
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	6	2.3
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	18	2.3
(1,262)	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	3	2.3
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	19	2.3
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	8	2.3
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	8	2.3
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	11	2.3
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	11	2.3
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1	2.3
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1	2.3
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	8	2.3
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	8	2.3
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	14	2.3
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	14	2.3
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	19	2.3
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	19	2.3
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	2	2.3
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	4	2.3
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	3	2.3
(1,194)	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	10	2.3
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	11	2.3
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	16	2.3
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	5	2.3
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	20	2.3
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	11	2.3
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	10	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	8	2.3
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	16	2.3
(1,164)	1:A:451:ILE:C	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	6	2.3
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	18	2.3
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	20	2.3
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	15	2.3
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	14	2.3
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	14	2.3
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	11	2.3
(1,14)	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	3	2.3
(1,14)	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	3	2.3
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	15	2.3
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1	2.3
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	7	2.3
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	1	2.3
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	18	2.3
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	18	2.3
(1,113)	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	9	2.3
(1,105)	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	5	2.3
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	20	2.3
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	20	2.3
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1	2.3
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1	2.3
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	2	2.2
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	9	2.2
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	16	2.2
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	8	2.2
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	19	2.2
(1,73)	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1	2.2
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	13	2.2
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	7	2.2
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	4	2.2
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	20	2.2
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	20	2.2
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	16	2.2
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	17	2.2
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	1	2.2
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	15	2.2
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	6	2.2
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	10	2.2
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	18	2.2
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	19	2.2
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	14	2.2
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	13	2.2
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	12	2.2
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	11	2.2
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	13	2.2
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	19	2.2
(1,381)	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	4	2.2
(1,380)	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	6	2.2
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	20	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	5	2.2
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	20	2.2
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	9	2.2
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	17	2.2
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	18	2.2
(1,337)	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	18	2.2
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	4	2.2
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	12	2.2
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	19	2.2
(1,320)	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	13	2.2
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	5	2.2
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	19	2.2
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	6	2.2
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	11	2.2
(1,287)	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	14	2.2
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	10	2.2
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1	2.2
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	15	2.2
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	12	2.2
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	16	2.2
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	15	2.2
(1,262)	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	13	2.2
(1,259)	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	4	2.2
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	13	2.2
(1,248)	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1	2.2
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	17	2.2
(1,234)	1:A:527:LYS:N	1:A:527:LYS:CA	1:A:527:LYS:C	1:A:528:GLU:N	4	2.2
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	12	2.2
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	12	2.2
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	9	2.2
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	9	2.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	5	2.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	5	2.2
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	14	2.2
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	14	2.2
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	13	2.2
(1,203)	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	3	2.2
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	5	2.2
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	12	2.2
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	12	2.2
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	16	2.2
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	9	2.2
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	14	2.2
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	5	2.2
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	6	2.2
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	19	2.2
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	14	2.2
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	17	2.2
(1,145)	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	11	2.2
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	5	2.2
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	3	2.2

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	9	2.2
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	8	2.2
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	11	2.2
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	12	2.2
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	13	2.2
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	15	2.2
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	9	2.2
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	11	2.2
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	6	2.2
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	9	2.2
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	1	2.2
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	3	2.2
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	6	2.2
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	7	2.2
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	18	2.2
(1,105)	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	6	2.2
(1,92)	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	6	2.1
(1,89)	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	9	2.1
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	3	2.1
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	12	2.1
(1,73)	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	15	2.1
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	15	2.1
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	18	2.1
(1,52)	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1	2.1
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	5	2.1
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	6	2.1
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	6	2.1
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	15	2.1
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	15	2.1
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	12	2.1
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	10	2.1
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	17	2.1
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1	2.1
(1,417)	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	1:A:493:ALA:N	17	2.1
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	12	2.1
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	2	2.1
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	6	2.1
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	4	2.1
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	15	2.1
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	2	2.1
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	14	2.1
(1,357)	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	17	2.1
(1,351)	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	1:A:427:PRO:N	20	2.1
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	13	2.1
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	14	2.1
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	19	2.1
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	15	2.1
(1,339)	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1	2.1
(1,332)	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	8	2.1
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1	2.1
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	15	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	12	2.1
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	13	2.1
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	17	2.1
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	19	2.1
(1,311)	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	13	2.1
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	6	2.1
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	7	2.1
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	9	2.1
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	16	2.1
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	18	2.1
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	11	2.1
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	2	2.1
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	3	2.1
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	15	2.1
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	4	2.1
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	5	2.1
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	17	2.1
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	3	2.1
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	14	2.1
(1,277)	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	7	2.1
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1	2.1
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	7	2.1
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1	2.1
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	3	2.1
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	10	2.1
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	8	2.1
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	5	2.1
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	14	2.1
(1,257)	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	16	2.1
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	15	2.1
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	4	2.1
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	3	2.1
(1,230)	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	1:A:524:GLU:N	6	2.1
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	4	2.1
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	4	2.1
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	14	2.1
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	14	2.1
(1,22)	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:CA	1:A:523:ASP:C	11	2.1
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	4	2.1
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	4	2.1
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	9	2.1
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	9	2.1
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	13	2.1
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	13	2.1
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	15	2.1
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	15	2.1
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	17	2.1
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	17	2.1
(1,173)	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	11	2.1
(1,172)	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	17	2.1
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	3	2.1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	4	2.1
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	18	2.1
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	11	2.1
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	18	2.1
(1,164)	1:A:451:ILE:C	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	19	2.1
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	2	2.1
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	7	2.1
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	8	2.1
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	19	2.1
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	8	2.1
(1,144)	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	18	2.1
(1,144)	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	20	2.1
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	6	2.1
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	4	2.1
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	18	2.1
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	15	2.1
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	17	2.1
(1,11)	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	15	2.1
(1,11)	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	15	2.1
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	19	2.1
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	13	2.1
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	14	2.1
(1,101)	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	15	2.1
(1,100)	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	15	2.1
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	7	2.0
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1	2.0
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	8	2.0
(1,93)	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	2	2.0
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	5	2.0
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	17	2.0
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	19	2.0
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	3	2.0
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	6	2.0
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	16	2.0
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	14	2.0
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	20	2.0
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	11	2.0
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	13	2.0
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	13	2.0
(1,53)	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	10	2.0
(1,53)	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	19	2.0
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	2	2.0
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	16	2.0
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	9	2.0
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	15	2.0
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	5	2.0
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	13	2.0
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	8	2.0
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	14	2.0
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	9	2.0
(1,406)	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,406)	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	10	2.0
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	16	2.0
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	3	2.0
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	9	2.0
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	3	2.0
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	3	2.0
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	18	2.0
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	19	2.0
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	9	2.0
(1,381)	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	18	2.0
(1,377)	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	9	2.0
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	20	2.0
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	8	2.0
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	11	2.0
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	14	2.0
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	20	2.0
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	12	2.0
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	14	2.0
(1,357)	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	2	2.0
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	14	2.0
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	4	2.0
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	14	2.0
(1,337)	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	3	2.0
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	10	2.0
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1	2.0
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	14	2.0
(1,333)	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	15	2.0
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	5	2.0
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	16	2.0
(1,311)	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	12	2.0
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	2	2.0
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	19	2.0
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	20	2.0
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	15	2.0
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	8	2.0
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	10	2.0
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	5	2.0
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	16	2.0
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	17	2.0
(1,273)	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	1:A:328:PRO:N	1	2.0
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	8	2.0
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	20	2.0
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	7	2.0
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	18	2.0
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	2	2.0
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	19	2.0
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	15	2.0
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	20	2.0
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	8	2.0
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	8	2.0
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	13	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	13	2.0
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	2	2.0
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	2	2.0
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	2	2.0
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	6	2.0
(1,205)	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1	2.0
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	12	2.0
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	12	2.0
(1,198)	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	19	2.0
(1,194)	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	18	2.0
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	6	2.0
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	10	2.0
(1,191)	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	12	2.0
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	18	2.0
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	18	2.0
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	11	2.0
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	3	2.0
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	3	2.0
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	6	2.0
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	19	2.0
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	7	2.0
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	14	2.0
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	3	2.0
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	17	2.0
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	6	2.0
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	6	2.0
(1,142)	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	10	2.0
(1,141)	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	16	2.0
(1,139)	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	7	2.0
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	7	2.0
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	11	2.0
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	19	2.0
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	14	2.0
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	9	2.0
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	9	2.0
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1	2.0
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	5	2.0
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	12	2.0
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	17	2.0
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	4	2.0
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	12	2.0
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	6	1.9
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	19	1.9
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	4	1.9
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	2	1.9
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	2	1.9
(1,86)	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	11	1.9
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	12	1.9
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	5	1.9
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	14	1.9
(1,79)	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	12	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,77)	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	20	1.9
(1,76)	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	8	1.9
(1,76)	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	20	1.9
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	16	1.9
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	14	1.9
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	8	1.9
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	8	1.9
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	14	1.9
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	17	1.9
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	2	1.9
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	13	1.9
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	17	1.9
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	2	1.9
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	5	1.9
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	13	1.9
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	17	1.9
(1,52)	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	14	1.9
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	16	1.9
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	12	1.9
(1,45)	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	12	1.9
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	13	1.9
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	17	1.9
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	20	1.9
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	12	1.9
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	4	1.9
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	17	1.9
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	8	1.9
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	11	1.9
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	17	1.9
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	9	1.9
(1,398)	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	11	1.9
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	19	1.9
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	17	1.9
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	7	1.9
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	11	1.9
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	6	1.9
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	7	1.9
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	7	1.9
(1,380)	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	17	1.9
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	8	1.9
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	12	1.9
(1,369)	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	1:A:445:GLY:N	10	1.9
(1,367)	1:A:442:TRP:N	1:A:442:TRP:CA	1:A:442:TRP:C	1:A:443:ALA:N	6	1.9
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	9	1.9
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	19	1.9
(1,360)	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	17	1.9
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	2	1.9
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	5	1.9
(1,352)	1:A:427:PRO:N	1:A:427:PRO:CA	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	9	1.9
(1,351)	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	1:A:427:PRO:N	7	1.9
(1,35)	1:A:289:VAL:C	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	2	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	20	1.9
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	8	1.9
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	8	1.9
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	13	1.9
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	5	1.9
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	5	1.9
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	2	1.9
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	18	1.9
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	10	1.9
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	16	1.9
(1,325)	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	8	1.9
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	7	1.9
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	17	1.9
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	1	1.9
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	4	1.9
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	7	1.9
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	11	1.9
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	14	1.9
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	4	1.9
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	12	1.9
(1,313)	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	1:A:368:SER:N	1	1.9
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	2	1.9
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	9	1.9
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	16	1.9
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	12	1.9
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	2	1.9
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	2	1.9
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	5	1.9
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	15	1.9
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	2	1.9
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	10	1.9
(1,286)	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	1	1.9
(1,284)	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	16	1.9
(1,272)	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	5	1.9
(1,263)	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	19	1.9
(1,262)	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	10	1.9
(1,259)	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	8	1.9
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	18	1.9
(1,249)	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	8	1.9
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	5	1.9
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	3	1.9
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1	1.9
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1	1.9
(1,219)	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	15	1.9
(1,219)	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	15	1.9
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	13	1.9
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	13	1.9
(1,21)	1:A:521:ILE:C	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	12	1.9
(1,203)	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	10	1.9
(1,200)	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	12	1.9
(1,20)	1:A:520:SER:C	1:A:521:ILE:N	1:A:521:ILE:CA	1:A:521:ILE:C	20	1.9

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	3	1.9
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	3	1.9
(1,198)	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	8	1.9
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	12	1.9
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	20	1.9
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	2	1.9
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	4	1.9
(1,192)	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	9	1.9
(1,192)	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	17	1.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	10	1.9
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	10	1.9
(1,187)	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	11	1.9
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	6	1.9
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	7	1.9
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	9	1.9
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	9	1.9
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	17	1.9
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	4	1.9
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	7	1.9
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	7	1.9
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	10	1.9
(1,164)	1:A:451:ILE:C	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	4	1.9
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	9	1.9
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	13	1.9
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	9	1.9
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	18	1.9
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	14	1.9
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	15	1.9
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	14	1.9
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	16	1.9
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	12	1.9
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	15	1.9
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	15	1.9
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	20	1.9
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	4	1.9
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	12	1.9
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	18	1.9
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	2	1.9
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	3	1.9
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	13	1.9
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	6	1.9
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	20	1.9
(1,126)	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	13	1.9
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	7	1.9
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1	1.9
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1	1.9
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1	1.9
(1,116)	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	3	1.9
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	15	1.9
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	16	1.8
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	12	1.8

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,89)	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	2	1.8
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	20	1.8
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	17	1.8
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	11	1.8
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	13	1.8
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	4	1.8
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	4	1.8
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	20	1.8
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	20	1.8
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	6	1.8
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	10	1.8
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	6	1.8
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	16	1.8
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	17	1.8
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	12	1.8
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	4	1.8
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	15	1.8
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	17	1.8
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	11	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	7	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	7	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	12	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	12	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	12	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	13	1.8
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	13	1.8
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	3	1.8
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	8	1.8
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	18	1.8
(1,417)	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	1:A:493:ALA:N	6	1.8
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	3	1.8
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	2	1.8
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	18	1.8
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	13	1.8
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	13	1.8
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	17	1.8
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	9	1.8
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	17	1.8
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	17	1.8
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	8	1.8
(1,381)	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	13	1.8
(1,380)	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	3	1.8
(1,379)	1:A:454:TYR:N	1:A:454:TYR:CA	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	19	1.8
(1,377)	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	18	1.8
(1,368)	1:A:443:ALA:N	1:A:443:ALA:CA	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	18	1.8
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	2	1.8
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	8	1.8
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	20	1.8
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	12	1.8
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	3	1.8
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	16	1.8
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	20	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	16	1.8
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	3	1.8
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	20	1.8
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	10	1.8
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	15	1.8
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	13	1.8
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	6	1.8
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	3	1.8
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	10	1.8
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	15	1.8
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	15	1.8
(1,307)	1:A:361:TYR:N	1:A:361:TYR:CA	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	2	1.8
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	12	1.8
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	18	1.8
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	8	1.8
(1,301)	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	17	1.8
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	4	1.8
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	10	1.8
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	13	1.8
(1,292)	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	19	1.8
(1,290)	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	17	1.8
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	13	1.8
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	10	1.8
(1,275)	1:A:329:PRO:N	1:A:329:PRO:CA	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	18	1.8
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	11	1.8
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	4	1.8
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1	1.8
(1,263)	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	8	1.8
(1,261)	1:A:315:PRO:N	1:A:315:PRO:CA	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	13	1.8
(1,261)	1:A:315:PRO:N	1:A:315:PRO:CA	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	14	1.8
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	2	1.8
(1,250)	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	8	1.8
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	10	1.8
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	10	1.8
(1,229)	1:A:522:SER:N	1:A:522:SER:CA	1:A:522:SER:C	1:A:523:ASP:N	9	1.8
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	15	1.8
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	15	1.8
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	3	1.8
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	3	1.8
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	5	1.8
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	5	1.8
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	12	1.8
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	12	1.8
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	20	1.8
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	20	1.8
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	20	1.8
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	20	1.8
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	2	1.8
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	2	1.8
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	12	1.8
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	12	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	4	1.8
(1,215)	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	1:A:503:PRO:N	4	1.8
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	8	1.8
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	8	1.8
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	13	1.8
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	13	1.8
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	7	1.8
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	7	1.8
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	12	1.8
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	12	1.8
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	1	1.8
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	6	1.8
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	18	1.8
(1,203)	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	15	1.8
(1,203)	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	19	1.8
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	2	1.8
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	4	1.8
(1,198)	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	15	1.8
(1,187)	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	6	1.8
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	11	1.8
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	20	1.8
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	20	1.8
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	4	1.8
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	8	1.8
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	6	1.8
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	5	1.8
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	19	1.8
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	5	1.8
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	13	1.8
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	11	1.8
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	11	1.8
(1,139)	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	8	1.8
(1,139)	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	9	1.8
(1,135)	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	10	1.8
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	7	1.8
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	2	1.8
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	20	1.8
(1,124)	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	3	1.8
(1,121)	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	11	1.8
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	15	1.8
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	19	1.8
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	10	1.8
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	10	1.8
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	13	1.8
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	13	1.8
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	16	1.8
(1,113)	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	6	1.8
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	9	1.8
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	10	1.8
(1,100)	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	8	1.8
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	14	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,88)	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	18	1.7
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	10	1.7
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	14	1.7
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	9	1.7
(1,79)	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	13	1.7
(1,76)	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	10	1.7
(1,76)	1:A:340:GLY:C	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	15	1.7
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	6	1.7
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	15	1.7
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	10	1.7
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	2	1.7
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	6	1.7
(1,69)	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	11	1.7
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	14	1.7
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	15	1.7
(1,60)	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1	1.7
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	3	1.7
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	18	1.7
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	20	1.7
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	7	1.7
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	10	1.7
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1	1.7
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	10	1.7
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1	1.7
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	14	1.7
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	1	1.7
(1,378)	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	1:A:454:TYR:N	1	1.7
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	7	1.7
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	14	1.7
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	15	1.7
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	20	1.7
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	5	1.7
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	15	1.7
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	4	1.7
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	14	1.7
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	7	1.7
(1,357)	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	20	1.7
(1,356)	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	8	1.7
(1,351)	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	1:A:427:PRO:N	6	1.7
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	5	1.7
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	3	1.7
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	2	1.7
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1	1.7
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	4	1.7
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	4	1.7
(1,330)	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	11	1.7
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	4	1.7
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	16	1.7
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	20	1.7
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1	1.7
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	16	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,313)	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	1:A:368:SER:N	16	1.7
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	20	1.7
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	1	1.7
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	10	1.7
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	12	1.7
(1,290)	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1	1.7
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	19	1.7
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	13	1.7
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	18	1.7
(1,277)	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	8	1.7
(1,273)	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	1:A:328:PRO:N	7	1.7
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	18	1.7
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	14	1.7
(1,261)	1:A:315:PRO:N	1:A:315:PRO:CA	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	20	1.7
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	11	1.7
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	12	1.7
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	13	1.7
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	11	1.7
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	8	1.7
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	13	1.7
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	10	1.7
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	5	1.7
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	12	1.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	18	1.7
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	18	1.7
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	2	1.7
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	2	1.7
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	6	1.7
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	6	1.7
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	13	1.7
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	13	1.7
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	8	1.7
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	8	1.7
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	18	1.7
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	18	1.7
(1,219)	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	14	1.7
(1,219)	1:A:506:ALA:N	1:A:506:ALA:CA	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	14	1.7
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	7	1.7
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	7	1.7
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	10	1.7
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	10	1.7
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	14	1.7
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	14	1.7
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	8	1.7
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	8	1.7
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	14	1.7
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	9	1.7
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	5	1.7
(1,192)	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	6	1.7
(1,192)	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	11	1.7
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	5	1.7

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	5	1.7
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	19	1.7
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	19	1.7
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	20	1.7
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	20	1.7
(1,186)	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	1:A:476:ARG:CA	1:A:476:ARG:C	10	1.7
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1	1.7
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	2	1.7
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	13	1.7
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1	1.7
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	2	1.7
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	14	1.7
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	4	1.7
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	12	1.7
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	13	1.7
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	12	1.7
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	18	1.7
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	14	1.7
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	19	1.7
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	5	1.7
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	5	1.7
(1,141)	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	2	1.7
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	9	1.7
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	16	1.7
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	3	1.7
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	8	1.7
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	12	1.7
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	12	1.7
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	12	1.7
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	10	1.7
(1,101)	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	2	1.7
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	8	1.7
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	8	1.7
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	13	1.7
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	13	1.7
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	2	1.6
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	3	1.6
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	15	1.6
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	10	1.6
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	17	1.6
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	10	1.6
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	10	1.6
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	16	1.6
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	16	1.6
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	7	1.6
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	17	1.6
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	7	1.6
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	9	1.6
(1,73)	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	16	1.6
(1,67)	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	18	1.6
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	20	1.6

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	14	1.6
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	14	1.6
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	5	1.6
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	7	1.6
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	2	1.6
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	14	1.6
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	19	1.6
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	2	1.6
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	16	1.6
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	17	1.6
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	13	1.6
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	20	1.6
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	14	1.6
(1,399)	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	20	1.6
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	6	1.6
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	5	1.6
(1,381)	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1	1.6
(1,377)	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1	1.6
(1,375)	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	11	1.6
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	13	1.6
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	5	1.6
(1,356)	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	12	1.6
(1,355)	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	16	1.6
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	20	1.6
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	2	1.6
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	9	1.6
(1,345)	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	1:A:400:ASP:N	16	1.6
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	5	1.6
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	3	1.6
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	13	1.6
(1,338)	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	17	1.6
(1,333)	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	2	1.6
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	13	1.6
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	18	1.6
(1,320)	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	20	1.6
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	11	1.6
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	12	1.6
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	13	1.6
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	3	1.6
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	11	1.6
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	16	1.6
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	3	1.6
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	12	1.6
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	7	1.6
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	10	1.6
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	16	1.6
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	8	1.6
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	18	1.6
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	20	1.6
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	14	1.6
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	20	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	12	1.6
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	14	1.6
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1	1.6
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	8	1.6
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	10	1.6
(1,267)	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	1:A:322:GLY:N	8	1.6
(1,267)	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	1:A:322:GLY:N	14	1.6
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	12	1.6
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	2	1.6
(1,252)	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	2	1.6
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	3	1.6
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	16	1.6
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	5	1.6
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	17	1.6
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	17	1.6
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	6	1.6
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	8	1.6
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	8	1.6
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	18	1.6
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	18	1.6
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	5	1.6
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	18	1.6
(1,198)	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	7	1.6
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	13	1.6
(1,196)	1:A:487:VAL:C	1:A:488:TYR:N	1:A:488:TYR:CA	1:A:488:TYR:C	17	1.6
(1,195)	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	13	1.6
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	3	1.6
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	15	1.6
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	13	1.6
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	13	1.6
(1,189)	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	19	1.6
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	4	1.6
(1,187)	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	16	1.6
(1,185)	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	11	1.6
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	7	1.6
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1	1.6
(1,174)	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	11	1.6
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	14	1.6
(1,164)	1:A:451:ILE:C	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	20	1.6
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	18	1.6
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	19	1.6
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	12	1.6
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	3	1.6
(1,142)	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	1	1.6
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	12	1.6
(1,136)	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	18	1.6
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	14	1.6
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	1	1.6
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	12	1.6
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	2	1.6
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	3	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,126)	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	10	1.6
(1,126)	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	18	1.6
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	2	1.6
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	12	1.6
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	16	1.6
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	7	1.6
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	8	1.6
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	9	1.6
(1,112)	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1	1.6
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	20	1.6
(1,107)	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	15	1.6
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	5	1.6
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	19	1.6
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	18	1.6
(1,93)	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	12	1.5
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	15	1.5
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	16	1.5
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	17	1.5
(1,86)	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1	1.5
(1,77)	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	7	1.5
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	20	1.5
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	8	1.5
(1,61)	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	12	1.5
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	20	1.5
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	6	1.5
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	7	1.5
(1,53)	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	20	1.5
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	15	1.5
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	20	1.5
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	20	1.5
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1	1.5
(1,45)	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	18	1.5
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	4	1.5
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	6	1.5
(1,419)	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	14	1.5
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	11	1.5
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	2	1.5
(1,414)	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	6	1.5
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	4	1.5
(1,406)	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	18	1.5
(1,395)	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	1:A:471:LEU:N	3	1.5
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	3	1.5
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	13	1.5
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	18	1.5
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	5	1.5
(1,379)	1:A:454:TYR:N	1:A:454:TYR:CA	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	4	1.5
(1,375)	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	7	1.5
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	12	1.5
(1,361)	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	11	1.5
(1,354)	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	1	1.5
(1,341)	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	14	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,340)	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	9	1.5
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	20	1.5
(1,331)	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	2	1.5
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1	1.5
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	8	1.5
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	18	1.5
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	1	1.5
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	10	1.5
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	12	1.5
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	6	1.5
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	18	1.5
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	8	1.5
(1,313)	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	1:A:368:SER:N	11	1.5
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	3	1.5
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	8	1.5
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	20	1.5
(1,307)	1:A:361:TYR:N	1:A:361:TYR:CA	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	5	1.5
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	15	1.5
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	18	1.5
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	8	1.5
(1,295)	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1	1.5
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	6	1.5
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	14	1.5
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	17	1.5
(1,287)	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	2	1.5
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	1	1.5
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	2	1.5
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	14	1.5
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	10	1.5
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	3	1.5
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	2	1.5
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1	1.5
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	14	1.5
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	16	1.5
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	20	1.5
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	12	1.5
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	14	1.5
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	14	1.5
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	9	1.5
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	9	1.5
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	7	1.5
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	7	1.5
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	11	1.5
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	11	1.5
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	12	1.5
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	12	1.5
(1,218)	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	16	1.5
(1,218)	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	16	1.5
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	16	1.5
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	16	1.5
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	5	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	5	1.5
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	7	1.5
(1,203)	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	20	1.5
(1,198)	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	18	1.5
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	16	1.5
(1,191)	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	17	1.5
(1,187)	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	2	1.5
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	3	1.5
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	3	1.5
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	9	1.5
(1,169)	1:A:456:MET:C	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	4	1.5
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	12	1.5
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	7	1.5
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	16	1.5
(1,159)	1:A:446:VAL:C	1:A:447:LEU:N	1:A:447:LEU:CA	1:A:447:LEU:C	20	1.5
(1,156)	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	6	1.5
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	16	1.5
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	20	1.5
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	2	1.5
(1,149)	1:A:436:SER:C	1:A:437:ILE:N	1:A:437:ILE:CA	1:A:437:ILE:C	4	1.5
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	4	1.5
(1,140)	1:A:427:PRO:C	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	16	1.5
(1,138)	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	1:A:425:THR:CA	1:A:425:THR:C	18	1.5
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	20	1.5
(1,131)	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1:A:396:VAL:CA	1:A:396:VAL:C	19	1.5
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	9	1.5
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	5	1.5
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	2	1.5
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	2	1.5
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	16	1.5
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	8	1.5
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	4	1.5
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	17	1.5
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	17	1.5
(1,112)	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	7	1.5
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	13	1.5
(1,100)	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	13	1.5
(1,97)	1:A:361:TYR:C	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	16	1.4
(1,96)	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	1:A:361:TYR:CA	1:A:361:TYR:C	4	1.4
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	14	1.4
(1,90)	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	11	1.4
(1,88)	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1	1.4
(1,88)	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	5	1.4
(1,87)	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	14	1.4
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	5	1.4
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	3	1.4
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	8	1.4
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	8	1.4
(1,70)	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	11	1.4
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	2	1.4
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	2	1.4

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,65)	1:A:329:PRO:C	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	17	1.4
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	3	1.4
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	6	1.4
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	6	1.4
(1,59)	1:A:321:LEU:C	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	20	1.4
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	2	1.4
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	7	1.4
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	11	1.4
(1,53)	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	14	1.4
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	5	1.4
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	5	1.4
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	9	1.4
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	9	1.4
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	18	1.4
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	19	1.4
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	2	1.4
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	3	1.4
(1,416)	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	2	1.4
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	12	1.4
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	16	1.4
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	2	1.4
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	2	1.4
(1,405)	1:A:480:PRO:N	1:A:480:PRO:CA	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	18	1.4
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	20	1.4
(1,402)	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	10	1.4
(1,397)	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	13	1.4
(1,397)	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	19	1.4
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	12	1.4
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	14	1.4
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	20	1.4
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	19	1.4
(1,39)	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	12	1.4
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	6	1.4
(1,387)	1:A:462:ILE:N	1:A:462:ILE:CA	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	17	1.4
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	9	1.4
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	11	1.4
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	13	1.4
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	12	1.4
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	17	1.4
(1,380)	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	2	1.4
(1,377)	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	8	1.4
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	4	1.4
(1,369)	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	1:A:445:GLY:N	2	1.4
(1,369)	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	1:A:445:GLY:N	11	1.4
(1,367)	1:A:442:TRP:N	1:A:442:TRP:CA	1:A:442:TRP:C	1:A:443:ALA:N	8	1.4
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	11	1.4
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	13	1.4
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1	1.4
(1,36)	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	20	1.4
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	10	1.4
(1,356)	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	7	1.4

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,355)	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	4	1.4
(1,351)	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	1:A:427:PRO:N	4	1.4
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	15	1.4
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	12	1.4
(1,347)	1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CA	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	15	1.4
(1,346)	1:A:421:PRO:N	1:A:421:PRO:CA	1:A:421:PRO:C	1:A:422:ILE:N	13	1.4
(1,341)	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	1:A:396:VAL:N	1	1.4
(1,334)	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	2	1.4
(1,334)	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	3	1.4
(1,330)	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	3	1.4
(1,330)	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	18	1.4
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	2	1.4
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1	1.4
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	16	1.4
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	8	1.4
(1,316)	1:A:370:MET:N	1:A:370:MET:CA	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1	1.4
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	13	1.4
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	18	1.4
(1,313)	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	1:A:368:SER:N	2	1.4
(1,310)	1:A:364:THR:N	1:A:364:THR:CA	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	11	1.4
(1,310)	1:A:364:THR:N	1:A:364:THR:CA	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	19	1.4
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	20	1.4
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	20	1.4
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	20	1.4
(1,296)	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	7	1.4
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	5	1.4
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	5	1.4
(1,284)	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	13	1.4
(1,281)	1:A:335:GLU:N	1:A:335:GLU:CA	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	6	1.4
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	12	1.4
(1,277)	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1:A:332:ILE:N	5	1.4
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	8	1.4
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	2	1.4
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	16	1.4
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	7	1.4
(1,258)	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	7	1.4
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	9	1.4
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1	1.4
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	5	1.4
(1,251)	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	11	1.4
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	13	1.4
(1,236)	1:A:529:LEU:N	1:A:529:LEU:CA	1:A:529:LEU:C	1:A:530:GLY:N	11	1.4
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	10	1.4
(1,222)	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	10	1.4
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	5	1.4
(1,221)	1:A:508:ILE:N	1:A:508:ILE:CA	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	5	1.4
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	20	1.4
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	20	1.4
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	8	1.4
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	8	1.4
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	2	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	2	1.4
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	18	1.4
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	18	1.4
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	5	1.4
(1,212)	1:A:499:PRO:N	1:A:499:PRO:CA	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	5	1.4
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	10	1.4
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	10	1.4
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	12	1.4
(1,210)	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	12	1.4
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	6	1.4
(1,209)	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	6	1.4
(1,203)	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	1:A:496:GLN:CA	1:A:496:GLN:C	16	1.4
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	2	1.4
(1,200)	1:A:491:MET:C	1:A:492:ARG:N	1:A:492:ARG:CA	1:A:492:ARG:C	9	1.4
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	17	1.4
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	17	1.4
(1,199)	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1:A:491:MET:CA	1:A:491:MET:C	3	1.4
(1,198)	1:A:489:GLU:C	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	10	1.4
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	9	1.4
(1,192)	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	16	1.4
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	12	1.4
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	3	1.4
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	3	1.4
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	17	1.4
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	17	1.4
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	8	1.4
(1,185)	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	17	1.4
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	4	1.4
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	12	1.4
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	5	1.4
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	10	1.4
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	4	1.4
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	4	1.4
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	4	1.4
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	3	1.4
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	12	1.4
(1,17)	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	13	1.4
(1,17)	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	13	1.4
(1,166)	1:A:453:THR:C	1:A:454:TYR:N	1:A:454:TYR:CA	1:A:454:TYR:C	6	1.4
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	17	1.4
(1,164)	1:A:451:ILE:C	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	7	1.4
(1,163)	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	1:A:451:ILE:CA	1:A:451:ILE:C	13	1.4
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	6	1.4
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	8	1.4
(1,159)	1:A:446:VAL:C	1:A:447:LEU:N	1:A:447:LEU:CA	1:A:447:LEU:C	15	1.4
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	20	1.4
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	13	1.4
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	20	1.4
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	20	1.4
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	20	1.4
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	5	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	9	1.4
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	11	1.4
(1,146)	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	13	1.4
(1,145)	1:A:432:TYR:C	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	4	1.4
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	9	1.4
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	10	1.4
(1,141)	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	4	1.4
(1,139)	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	20	1.4
(1,134)	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	12	1.4
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	12	1.4
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	7	1.4
(1,127)	1:A:391:GLY:C	1:A:392:GLU:N	1:A:392:GLU:CA	1:A:392:GLU:C	6	1.4
(1,122)	1:A:386:ARG:C	1:A:387:ASN:N	1:A:387:ASN:CA	1:A:387:ASN:C	9	1.4
(1,120)	1:A:384:ALA:C	1:A:385:ALA:N	1:A:385:ALA:CA	1:A:385:ALA:C	4	1.4
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	12	1.4
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	18	1.4
(1,113)	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	5	1.4
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	4	1.4
(1,110)	1:A:374:GLU:C	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	7	1.4
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	3	1.4
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	10	1.4
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	13	1.4
(1,101)	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	19	1.4
(1,100)	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:C	6	1.4
(1,93)	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	3	1.3
(1,93)	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	13	1.3
(1,93)	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	19	1.3
(1,85)	1:A:349:CYS:C	1:A:350:ASN:N	1:A:350:ASN:CA	1:A:350:ASN:C	15	1.3
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	8	1.3
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	13	1.3
(1,79)	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	8	1.3
(1,79)	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	16	1.3
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	14	1.3
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	5	1.3
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	3	1.3
(1,62)	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	10	1.3
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	4	1.3
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	4	1.3
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	12	1.3
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1	1.3
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	8	1.3
(1,52)	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	11	1.3
(1,51)	1:A:312:ILE:C	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	14	1.3
(1,50)	1:A:311:GLU:C	1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CA	1:A:312:ILE:C	1	1.3
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	8	1.3
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	8	1.3
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	4	1.3
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	14	1.3
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	8	1.3
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	16	1.3
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	7	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,418)	1:A:493:ALA:N	1:A:493:ALA:CA	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	17	1.3
(1,413)	1:A:488:TYR:N	1:A:488:TYR:CA	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	13	1.3
(1,412)	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	1:A:488:TYR:N	12	1.3
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	7	1.3
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	7	1.3
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	11	1.3
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	12	1.3
(1,394)	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	18	1.3
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	5	1.3
(1,393)	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	11	1.3
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	2	1.3
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	18	1.3
(1,389)	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	9	1.3
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	13	1.3
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	16	1.3
(1,385)	1:A:460:PRO:N	1:A:460:PRO:CA	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	2	1.3
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	15	1.3
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	17	1.3
(1,378)	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	1:A:454:TYR:N	16	1.3
(1,377)	1:A:452:ALA:N	1:A:452:ALA:CA	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	5	1.3
(1,366)	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	18	1.3
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	6	1.3
(1,365)	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	16	1.3
(1,364)	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	17	1.3
(1,363)	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	7	1.3
(1,358)	1:A:433:ASN:N	1:A:433:ASN:CA	1:A:433:ASN:C	1:A:434:LYS:N	6	1.3
(1,348)	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	12	1.3
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	14	1.3
(1,34)	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	1:A:289:VAL:CA	1:A:289:VAL:C	10	1.3
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	19	1.3
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	5	1.3
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	5	1.3
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	8	1.3
(1,317)	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	1:A:372:TYR:N	15	1.3
(1,310)	1:A:364:THR:N	1:A:364:THR:CA	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	3	1.3
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	15	1.3
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	9	1.3
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	1	1.3
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	16	1.3
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	5	1.3
(1,301)	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	14	1.3
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	11	1.3
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	11	1.3
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	13	1.3
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	13	1.3
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	2	1.3
(1,299)	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	1:A:354:VAL:N	20	1.3
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	10	1.3
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	14	1.3
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	10	1.3
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	1	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,291)	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	18	1.3
(1,290)	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	11	1.3
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	2	1.3
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	11	1.3
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	3	1.3
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	7	1.3
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	11	1.3
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	18	1.3
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	9	1.3
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	17	1.3
(1,283)	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	1:A:338:THR:N	18	1.3
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	7	1.3
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	5	1.3
(1,276)	1:A:330:PHE:N	1:A:330:PHE:CA	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	7	1.3
(1,273)	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	1:A:328:PRO:N	13	1.3
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	19	1.3
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	12	1.3
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	20	1.3
(1,262)	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	14	1.3
(1,262)	1:A:316:ASN:N	1:A:316:ASN:CA	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	20	1.3
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	9	1.3
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	6	1.3
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	6	1.3
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	13	1.3
(1,227)	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	13	1.3
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	17	1.3
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	17	1.3
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	9	1.3
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	9	1.3
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	15	1.3
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	15	1.3
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	17	1.3
(1,223)	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	17	1.3
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	10	1.3
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	10	1.3
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	14	1.3
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	14	1.3
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	5	1.3
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	5	1.3
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	11	1.3
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	11	1.3
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	16	1.3
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	16	1.3
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	6	1.3
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	7	1.3
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	20	1.3
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	1	1.3
(1,194)	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	11	1.3
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	6	1.3
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	16	1.3
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	16	1.3

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	18	1.3
(1,185)	1:A:474:ASP:C	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	2	1.3
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	7	1.3
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	10	1.3
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	5	1.3
(1,183)	1:A:472:GLU:C	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	6	1.3
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	13	1.3
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	15	1.3
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	15	1.3
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	15	1.3
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	15	1.3
(1,177)	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	16	1.3
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	17	1.3
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	10	1.3
(1,173)	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	14	1.3
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	10	1.3
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	19	1.3
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	6	1.3
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	5	1.3
(1,163)	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	1:A:451:ILE:CA	1:A:451:ILE:C	3	1.3
(1,163)	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	1:A:451:ILE:CA	1:A:451:ILE:C	9	1.3
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1	1.3
(1,160)	1:A:447:LEU:C	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	17	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	4	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	4	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	10	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	10	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	11	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	11	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	12	1.3
(1,16)	1:A:510:GLN:C	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	12	1.3
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	7	1.3
(1,154)	1:A:441:VAL:C	1:A:442:TRP:N	1:A:442:TRP:CA	1:A:442:TRP:C	4	1.3
(1,153)	1:A:440:ASP:C	1:A:441:VAL:N	1:A:441:VAL:CA	1:A:441:VAL:C	11	1.3
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	10	1.3
(1,150)	1:A:437:ILE:C	1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:CA	1:A:438:LYS:C	12	1.3
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	3	1.3
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	3	1.3
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	17	1.3
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	17	1.3
(1,148)	1:A:435:PHE:C	1:A:436:SER:N	1:A:436:SER:CA	1:A:436:SER:C	9	1.3
(1,144)	1:A:431:ALA:C	1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CA	1:A:432:TYR:C	13	1.3
(1,142)	1:A:429:SER:C	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	5	1.3
(1,141)	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	1:A:429:SER:CA	1:A:429:SER:C	5	1.3
(1,139)	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	15	1.3
(1,139)	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	1:A:426:ALA:CA	1:A:426:ALA:C	18	1.3
(1,133)	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	17	1.3
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	9	1.3
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	15	1.3
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	15	1.3
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	20	1.3

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	20	1.3
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1	1.3
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	4	1.3
(1,117)	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	19	1.3
(1,116)	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	17	1.3
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	7	1.3
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	20	1.3
(1,106)	1:A:370:MET:C	1:A:371:GLU:N	1:A:371:GLU:CA	1:A:371:GLU:C	9	1.3
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	7	1.3
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	11	1.3
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	6	1.3
(1,10)	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	6	1.3
(1,99)	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	1:A:364:THR:CA	1:A:364:THR:C	9	1.2
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	15	1.2
(1,93)	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	7	1.2
(1,92)	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	18	1.2
(1,88)	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	1:A:353:GLU:CA	1:A:353:GLU:C	16	1.2
(1,86)	1:A:350:ASN:C	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	15	1.2
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	20	1.2
(1,82)	1:A:346:LEU:C	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	6	1.2
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	1	1.2
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	12	1.2
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	16	1.2
(1,72)	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	1:A:337:MET:CA	1:A:337:MET:C	11	1.2
(1,71)	1:A:335:GLU:C	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	16	1.2
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	17	1.2
(1,7)	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	1:A:502:ARG:CA	1:A:502:ARG:C	17	1.2
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	10	1.2
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	1	1.2
(1,66)	1:A:330:PHE:C	1:A:331:TYR:N	1:A:331:TYR:CA	1:A:331:TYR:C	8	1.2
(1,64)	1:A:326:ARG:C	1:A:327:GLU:N	1:A:327:GLU:CA	1:A:327:GLU:C	7	1.2
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	16	1.2
(1,6)	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	16	1.2
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	8	1.2
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	3	1.2
(1,54)	1:A:316:ASN:C	1:A:317:LEU:N	1:A:317:LEU:CA	1:A:317:LEU:C	9	1.2
(1,48)	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	5	1.2
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	19	1.2
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	17	1.2
(1,44)	1:A:305:GLU:C	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	19	1.2
(1,422)	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	7	1.2
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	6	1.2
(1,421)	1:A:516:PHE:N	1:A:516:PHE:CA	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	17	1.2
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	13	1.2
(1,42)	1:A:303:LEU:C	1:A:304:LYS:N	1:A:304:LYS:CA	1:A:304:LYS:C	3	1.2
(1,413)	1:A:488:TYR:N	1:A:488:TYR:CA	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	9	1.2
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	7	1.2
(1,410)	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	1:A:486:LYS:N	12	1.2
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	12	1.2
(1,41)	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	1:A:303:LEU:CA	1:A:303:LEU:C	16	1.2
(1,408)	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	1:A:484:PRO:N	7	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,407)	1:A:482:GLY:N	1:A:482:GLY:CA	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	10	1.2
(1,406)	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	1:A:482:GLY:N	5	1.2
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	3	1.2
(1,400)	1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CA	1:A:475:TYR:C	1:A:476:ARG:N	5	1.2
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	1	1.2
(1,398)	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	6	1.2
(1,396)	1:A:471:LEU:N	1:A:471:LEU:CA	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	10	1.2
(1,392)	1:A:467:VAL:N	1:A:467:VAL:CA	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	4	1.2
(1,391)	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	1:A:467:VAL:N	1	1.2
(1,389)	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	11	1.2
(1,389)	1:A:464:LEU:N	1:A:464:LEU:CA	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	15	1.2
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	8	1.2
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	9	1.2
(1,382)	1:A:457:SER:N	1:A:457:SER:CA	1:A:457:SER:C	1:A:458:PRO:N	10	1.2
(1,38)	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	18	1.2
(1,370)	1:A:445:GLY:N	1:A:445:GLY:CA	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	5	1.2
(1,37)	1:A:298:GLU:C	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	3	1.2
(1,369)	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	1:A:445:GLY:N	1	1.2
(1,369)	1:A:444:PHE:N	1:A:444:PHE:CA	1:A:444:PHE:C	1:A:445:GLY:N	14	1.2
(1,359)	1:A:434:LYS:N	1:A:434:LYS:CA	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	7	1.2
(1,355)	1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CA	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	3	1.2
(1,353)	1:A:428:GLU:N	1:A:428:GLU:CA	1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:N	17	1.2
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	2	1.2
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	3	1.2
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	7	1.2
(1,343)	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	2	1.2
(1,336)	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	12	1.2
(1,335)	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	7	1.2
(1,334)	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	14	1.2
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	8	1.2
(1,328)	1:A:382:ASP:N	1:A:382:ASP:CA	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	19	1.2
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	3	1.2
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	11	1.2
(1,324)	1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CA	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	20	1.2
(1,322)	1:A:376:LYS:N	1:A:376:LYS:CA	1:A:376:LYS:C	1:A:377:ASN:N	3	1.2
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	4	1.2
(1,318)	1:A:372:TYR:N	1:A:372:TYR:CA	1:A:372:TYR:C	1:A:373:LEU:N	6	1.2
(1,312)	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	8	1.2
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	12	1.2
(1,309)	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	1:A:364:THR:N	20	1.2
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	17	1.2
(1,306)	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	19	1.2
(1,303)	1:A:357:VAL:N	1:A:357:VAL:CA	1:A:357:VAL:C	1:A:358:VAL:N	14	1.2
(1,301)	1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:CA	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	8	1.2
(1,300)	1:A:354:VAL:N	1:A:354:VAL:CA	1:A:354:VAL:C	1:A:355:ASN:N	12	1.2
(1,298)	1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CA	1:A:352:GLN:C	1:A:353:GLU:N	19	1.2
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	15	1.2
(1,290)	1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:CA	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	12	1.2
(1,287)	1:A:341:ASN:N	1:A:341:ASN:CA	1:A:341:ASN:C	1:A:342:LEU:N	11	1.2
(1,284)	1:A:338:THR:N	1:A:338:THR:CA	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	2	1.2
(1,282)	1:A:336:PHE:N	1:A:336:PHE:CA	1:A:336:PHE:C	1:A:337:MET:N	12	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,280)	1:A:334:THR:N	1:A:334:THR:CA	1:A:334:THR:C	1:A:335:GLU:N	3	1.2
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	12	1.2
(1,271)	1:A:325:THR:N	1:A:325:THR:CA	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	17	1.2
(1,268)	1:A:322:GLY:N	1:A:322:GLY:CA	1:A:322:GLY:C	1:A:323:VAL:N	20	1.2
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	5	1.2
(1,265)	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	6	1.2
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	18	1.2
(1,259)	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	7	1.2
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	5	1.2
(1,256)	1:A:310:LYS:N	1:A:310:LYS:CA	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	11	1.2
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	7	1.2
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	3	1.2
(1,254)	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	15	1.2
(1,252)	1:A:306:ALA:N	1:A:306:ALA:CA	1:A:306:ALA:C	1:A:307:ALA:N	18	1.2
(1,248)	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	1:A:303:LEU:N	17	1.2
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	4	1.2
(1,245)	1:A:299:VAL:N	1:A:299:VAL:CA	1:A:299:VAL:C	1:A:300:GLU:N	3	1.2
(1,241)	1:A:288:ALA:N	1:A:288:ALA:CA	1:A:288:ALA:C	1:A:289:VAL:N	17	1.2
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	14	1.2
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	14	1.2
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	20	1.2
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	20	1.2
(1,218)	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	18	1.2
(1,218)	1:A:505:PHE:N	1:A:505:PHE:CA	1:A:505:PHE:C	1:A:506:ALA:N	18	1.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	6	1.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	6	1.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	20	1.2
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	20	1.2
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	3	1.2
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	3	1.2
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	16	1.2
(1,216)	1:A:503:PRO:N	1:A:503:PRO:CA	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	16	1.2
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	13	1.2
(1,214)	1:A:501:ASP:N	1:A:501:ASP:CA	1:A:501:ASP:C	1:A:502:ARG:N	13	1.2
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	3	1.2
(1,213)	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	1:A:501:ASP:N	3	1.2
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	19	1.2
(1,211)	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	1:A:499:PRO:N	19	1.2
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	9	1.2
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	9	1.2
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	16	1.2
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	16	1.2
(1,207)	1:A:517:GLN:C	1:A:518:GLU:N	1:A:518:GLU:CA	1:A:518:GLU:C	15	1.2
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	2	1.2
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	16	1.2
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	19	1.2
(1,192)	1:A:482:GLY:C	1:A:483:CYS:N	1:A:483:CYS:CA	1:A:483:CYS:C	15	1.2
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	16	1.2
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	9	1.2
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	15	1.2
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	17	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	12	1.2
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	8	1.2
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	2	1.2
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	2	1.2
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	3	1.2
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	6	1.2
(1,173)	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	7	1.2
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	5	1.2
(1,168)	1:A:455:GLY:C	1:A:456:MET:N	1:A:456:MET:CA	1:A:456:MET:C	9	1.2
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	14	1.2
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	18	1.2
(1,167)	1:A:454:TYR:C	1:A:455:GLY:N	1:A:455:GLY:CA	1:A:455:GLY:C	20	1.2
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	1	1.2
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	4	1.2
(1,161)	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	12	1.2
(1,152)	1:A:439:SER:C	1:A:440:ASP:N	1:A:440:ASP:CA	1:A:440:ASP:C	12	1.2
(1,14)	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	20	1.2
(1,14)	1:A:508:ILE:C	1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CA	1:A:509:HIS:C	20	1.2
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	10	1.2
(1,128)	1:A:392:GLU:C	1:A:393:ASN:N	1:A:393:ASN:CA	1:A:393:ASN:C	14	1.2
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	18	1.2
(1,124)	1:A:388:CYS:C	1:A:389:LEU:N	1:A:389:LEU:CA	1:A:389:LEU:C	2	1.2
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	9	1.2
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	14	1.2
(1,118)	1:A:382:ASP:C	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	18	1.2
(1,116)	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	18	1.2
(1,115)	1:A:379:ILE:C	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	11	1.2
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	3	1.2
(1,101)	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	1	1.2
(1,101)	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	12	1.2
(1,98)	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	1:A:363:ALA:CA	1:A:363:ALA:C	16	1.1
(1,96)	1:A:360:LEU:C	1:A:361:TYR:N	1:A:361:TYR:CA	1:A:361:TYR:C	11	1.1
(1,95)	1:A:359:LEU:C	1:A:360:LEU:N	1:A:360:LEU:CA	1:A:360:LEU:C	20	1.1
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	9	1.1
(1,91)	1:A:355:ASN:C	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	14	1.1
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	13	1.1
(1,9)	1:A:503:PRO:C	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	13	1.1
(1,84)	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	1:A:349:CYS:CA	1:A:349:CYS:C	1	1.1
(1,83)	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	4	1.1
(1,81)	1:A:345:TYR:C	1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CA	1:A:346:LEU:C	19	1.1
(1,80)	1:A:344:ASP:C	1:A:345:TYR:N	1:A:345:TYR:CA	1:A:345:TYR:C	2	1.1
(1,75)	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	1:A:340:GLY:CA	1:A:340:GLY:C	16	1.1
(1,74)	1:A:338:THR:C	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	2	1.1
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1	1.1
(1,68)	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	19	1.1
(1,63)	1:A:325:THR:C	1:A:326:ARG:N	1:A:326:ARG:CA	1:A:326:ARG:C	14	1.1
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	10	1.1
(1,58)	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	1:A:321:LEU:CA	1:A:321:LEU:C	11	1.1
(1,57)	1:A:319:GLN:C	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	16	1.1
(1,56)	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	1:A:319:GLN:CA	1:A:319:GLN:C	13	1.1
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	6	1.1
(1,55)	1:A:317:LEU:C	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	19	1.1
(1,52)	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	9	1.1
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	4	1.1
(1,5)	1:A:499:PRO:C	1:A:500:SER:N	1:A:500:SER:CA	1:A:500:SER:C	4	1.1
(1,49)	1:A:310:LYS:C	1:A:311:GLU:N	1:A:311:GLU:CA	1:A:311:GLU:C	8	1.1
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	12	1.1
(1,47)	1:A:308:VAL:C	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	13	1.1
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	1	1.1
(1,46)	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	1:A:308:VAL:CA	1:A:308:VAL:C	8	1.1
(1,43)	1:A:304:LYS:C	1:A:305:GLU:N	1:A:305:GLU:CA	1:A:305:GLU:C	1	1.1
(1,420)	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	1:A:516:PHE:N	14	1.1
(1,415)	1:A:490:LEU:N	1:A:490:LEU:CA	1:A:490:LEU:C	1:A:491:MET:N	1	1.1
(1,412)	1:A:487:VAL:N	1:A:487:VAL:CA	1:A:487:VAL:C	1:A:488:TYR:N	4	1.1
(1,411)	1:A:486:LYS:N	1:A:486:LYS:CA	1:A:486:LYS:C	1:A:487:VAL:N	18	1.1
(1,409)	1:A:484:PRO:N	1:A:484:PRO:CA	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	6	1.1
(1,404)	1:A:479:ARG:N	1:A:479:ARG:CA	1:A:479:ARG:C	1:A:480:PRO:N	15	1.1
(1,403)	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1:A:479:ARG:N	2	1.1
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	2	1.1
(1,40)	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	1:A:302:PHE:CA	1:A:302:PHE:C	18	1.1
(1,398)	1:A:473:LYS:N	1:A:473:LYS:CA	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	16	1.1
(1,390)	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	15	1.1
(1,388)	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	1:A:464:LEU:N	14	1.1
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	1	1.1
(1,386)	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	1:A:462:ILE:N	15	1.1
(1,384)	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	1:A:460:PRO:N	11	1.1
(1,383)	1:A:458:PRO:N	1:A:458:PRO:CA	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	6	1.1
(1,378)	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	1:A:454:TYR:N	7	1.1
(1,375)	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	1:A:451:ILE:N	17	1.1
(1,374)	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1	1.1
(1,373)	1:A:448:LEU:N	1:A:448:LEU:CA	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	12	1.1
(1,368)	1:A:443:ALA:N	1:A:443:ALA:CA	1:A:443:ALA:C	1:A:444:PHE:N	16	1.1
(1,350)	1:A:425:THR:N	1:A:425:THR:CA	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	8	1.1
(1,350)	1:A:425:THR:N	1:A:425:THR:CA	1:A:425:THR:C	1:A:426:ALA:N	12	1.1
(1,349)	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	8	1.1
(1,344)	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	9	1.1
(1,329)	1:A:383:LEU:N	1:A:383:LEU:CA	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	3	1.1
(1,327)	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	1:A:382:ASP:N	12	1.1
(1,326)	1:A:380:HIS:N	1:A:380:HIS:CA	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	2	1.1
(1,323)	1:A:377:ASN:N	1:A:377:ASN:CA	1:A:377:ASN:C	1:A:378:PHE:N	13	1.1
(1,321)	1:A:375:LYS:N	1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:C	1:A:376:LYS:N	19	1.1
(1,319)	1:A:373:LEU:N	1:A:373:LEU:CA	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	15	1.1
(1,315)	1:A:369:ALA:N	1:A:369:ALA:CA	1:A:369:ALA:C	1:A:370:MET:N	20	1.1
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	6	1.1
(1,314)	1:A:368:SER:N	1:A:368:SER:CA	1:A:368:SER:C	1:A:369:ALA:N	20	1.1
(1,313)	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	1:A:368:SER:N	6	1.1
(1,310)	1:A:364:THR:N	1:A:364:THR:CA	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	1	1.1
(1,310)	1:A:364:THR:N	1:A:364:THR:CA	1:A:364:THR:C	1:A:365:GLN:N	4	1.1
(1,308)	1:A:362:MET:N	1:A:362:MET:CA	1:A:362:MET:C	1:A:363:ALA:N	12	1.1
(1,304)	1:A:358:VAL:N	1:A:358:VAL:CA	1:A:358:VAL:C	1:A:359:LEU:N	17	1.1
(1,302)	1:A:356:ALA:N	1:A:356:ALA:CA	1:A:356:ALA:C	1:A:357:VAL:N	9	1.1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	14	1.1
(1,3)	1:A:497:TRP:C	1:A:498:ASN:N	1:A:498:ASN:CA	1:A:498:ASN:C	14	1.1
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	7	1.1
(1,297)	1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:C	1:A:352:GLN:N	13	1.1
(1,294)	1:A:348:GLU:N	1:A:348:GLU:CA	1:A:348:GLU:C	1:A:349:CYS:N	2	1.1
(1,293)	1:A:347:ARG:N	1:A:347:ARG:CA	1:A:347:ARG:C	1:A:348:GLU:N	17	1.1
(1,289)	1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CA	1:A:343:LEU:C	1:A:344:ASP:N	6	1.1
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	2	1.1
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	11	1.1
(1,288)	1:A:342:LEU:N	1:A:342:LEU:CA	1:A:342:LEU:C	1:A:343:LEU:N	19	1.1
(1,285)	1:A:339:TYR:N	1:A:339:TYR:CA	1:A:339:TYR:C	1:A:340:GLY:N	20	1.1
(1,279)	1:A:333:ILE:N	1:A:333:ILE:CA	1:A:333:ILE:C	1:A:334:THR:N	10	1.1
(1,278)	1:A:332:ILE:N	1:A:332:ILE:CA	1:A:332:ILE:C	1:A:333:ILE:N	3	1.1
(1,274)	1:A:328:PRO:N	1:A:328:PRO:CA	1:A:328:PRO:C	1:A:329:PRO:N	5	1.1
(1,270)	1:A:324:CYS:N	1:A:324:CYS:CA	1:A:324:CYS:C	1:A:325:THR:N	14	1.1
(1,269)	1:A:323:VAL:N	1:A:323:VAL:CA	1:A:323:VAL:C	1:A:324:CYS:N	5	1.1
(1,266)	1:A:320:LEU:N	1:A:320:LEU:CA	1:A:320:LEU:C	1:A:321:LEU:N	17	1.1
(1,264)	1:A:318:VAL:N	1:A:318:VAL:CA	1:A:318:VAL:C	1:A:319:GLN:N	9	1.1
(1,261)	1:A:315:PRO:N	1:A:315:PRO:CA	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	2	1.1
(1,261)	1:A:315:PRO:N	1:A:315:PRO:CA	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	18	1.1
(1,261)	1:A:315:PRO:N	1:A:315:PRO:CA	1:A:315:PRO:C	1:A:316:ASN:N	19	1.1
(1,260)	1:A:314:HIS:N	1:A:314:HIS:CA	1:A:314:HIS:C	1:A:315:PRO:N	19	1.1
(1,259)	1:A:313:LYS:N	1:A:313:LYS:CA	1:A:313:LYS:C	1:A:314:HIS:N	10	1.1
(1,255)	1:A:309:MET:N	1:A:309:MET:CA	1:A:309:MET:C	1:A:310:LYS:N	10	1.1
(1,253)	1:A:307:ALA:N	1:A:307:ALA:CA	1:A:307:ALA:C	1:A:308:VAL:N	4	1.1
(1,247)	1:A:301:GLU:N	1:A:301:GLU:CA	1:A:301:GLU:C	1:A:302:PHE:N	7	1.1
(1,246)	1:A:300:GLU:N	1:A:300:GLU:CA	1:A:300:GLU:C	1:A:301:GLU:N	10	1.1
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	7	1.1
(1,244)	1:A:291:THR:N	1:A:291:THR:CA	1:A:291:THR:C	1:A:292:LEU:N	20	1.1
(1,243)	1:A:290:LYS:N	1:A:290:LYS:CA	1:A:290:LYS:C	1:A:291:THR:N	12	1.1
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	18	1.1
(1,226)	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	18	1.1
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	16	1.1
(1,225)	1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CA	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	16	1.1
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	19	1.1
(1,224)	1:A:511:ALA:N	1:A:511:ALA:CA	1:A:511:ALA:C	1:A:512:PHE:N	19	1.1
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	19	1.1
(1,220)	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	1:A:508:ILE:N	19	1.1
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	15	1.1
(1,217)	1:A:504:SER:N	1:A:504:SER:CA	1:A:504:SER:C	1:A:505:PHE:N	15	1.1
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	14	1.1
(1,208)	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	1:A:496:GLN:N	14	1.1
(1,206)	1:A:516:PHE:C	1:A:517:GLN:N	1:A:517:GLN:CA	1:A:517:GLN:C	3	1.1
(1,204)	1:A:514:THR:C	1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:CA	1:A:515:MET:C	12	1.1
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	1	1.1
(1,202)	1:A:493:ALA:C	1:A:494:CYS:N	1:A:494:CYS:CA	1:A:494:CYS:C	15	1.1
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	15	1.1
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	15	1.1
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	16	1.1
(1,2)	1:A:496:GLN:C	1:A:497:TRP:N	1:A:497:TRP:CA	1:A:497:TRP:C	16	1.1
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	10	1.1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	14	1.1
(1,197)	1:A:488:TYR:C	1:A:489:GLU:N	1:A:489:GLU:CA	1:A:489:GLU:C	15	1.1
(1,193)	1:A:484:PRO:C	1:A:485:GLU:N	1:A:485:GLU:CA	1:A:485:GLU:C	8	1.1
(1,190)	1:A:480:PRO:C	1:A:481:GLU:N	1:A:481:GLU:CA	1:A:481:GLU:C	10	1.1
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1	1.1
(1,19)	1:A:513:GLU:C	1:A:514:THR:N	1:A:514:THR:CA	1:A:514:THR:C	1	1.1
(1,188)	1:A:477:MET:C	1:A:478:GLU:N	1:A:478:GLU:CA	1:A:478:GLU:C	1	1.1
(1,187)	1:A:476:ARG:C	1:A:477:MET:N	1:A:477:MET:CA	1:A:477:MET:C	19	1.1
(1,184)	1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASP:N	1:A:474:ASP:CA	1:A:474:ASP:C	8	1.1
(1,182)	1:A:471:LEU:C	1:A:472:GLU:N	1:A:472:GLU:CA	1:A:472:GLU:C	15	1.1
(1,180)	1:A:469:GLU:C	1:A:470:LEU:N	1:A:470:LEU:CA	1:A:470:LEU:C	4	1.1
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	6	1.1
(1,18)	1:A:512:PHE:C	1:A:513:GLU:N	1:A:513:GLU:CA	1:A:513:GLU:C	6	1.1
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	12	1.1
(1,179)	1:A:468:TYR:C	1:A:469:GLU:N	1:A:469:GLU:CA	1:A:469:GLU:C	17	1.1
(1,178)	1:A:467:VAL:C	1:A:468:TYR:N	1:A:468:TYR:CA	1:A:468:TYR:C	2	1.1
(1,176)	1:A:465:SER:C	1:A:466:GLN:N	1:A:466:GLN:CA	1:A:466:GLN:C	3	1.1
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	6	1.1
(1,175)	1:A:464:LEU:C	1:A:465:SER:N	1:A:465:SER:CA	1:A:465:SER:C	16	1.1
(1,173)	1:A:462:ILE:C	1:A:463:ASP:N	1:A:463:ASP:CA	1:A:463:ASP:C	17	1.1
(1,171)	1:A:460:PRO:C	1:A:461:GLY:N	1:A:461:GLY:CA	1:A:461:GLY:C	9	1.1
(1,170)	1:A:458:PRO:C	1:A:459:TYR:N	1:A:459:TYR:CA	1:A:459:TYR:C	10	1.1
(1,165)	1:A:452:ALA:C	1:A:453:THR:N	1:A:453:THR:CA	1:A:453:THR:C	7	1.1
(1,162)	1:A:449:TRP:C	1:A:450:GLU:N	1:A:450:GLU:CA	1:A:450:GLU:C	4	1.1
(1,161)	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	5	1.1
(1,161)	1:A:448:LEU:C	1:A:449:TRP:N	1:A:449:TRP:CA	1:A:449:TRP:C	18	1.1
(1,159)	1:A:446:VAL:C	1:A:447:LEU:N	1:A:447:LEU:CA	1:A:447:LEU:C	3	1.1
(1,158)	1:A:445:GLY:C	1:A:446:VAL:N	1:A:446:VAL:CA	1:A:446:VAL:C	14	1.1
(1,151)	1:A:438:LYS:C	1:A:439:SER:N	1:A:439:SER:CA	1:A:439:SER:C	3	1.1
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	8	1.1
(1,15)	1:A:509:HIS:C	1:A:510:GLN:N	1:A:510:GLN:CA	1:A:510:GLN:C	8	1.1
(1,147)	1:A:434:LYS:C	1:A:435:PHE:N	1:A:435:PHE:CA	1:A:435:PHE:C	5	1.1
(1,143)	1:A:430:LEU:C	1:A:431:ALA:N	1:A:431:ALA:CA	1:A:431:ALA:C	14	1.1
(1,138)	1:A:424:TRP:C	1:A:425:THR:N	1:A:425:THR:CA	1:A:425:THR:C	14	1.1
(1,137)	1:A:423:LYS:C	1:A:424:TRP:N	1:A:424:TRP:CA	1:A:424:TRP:C	9	1.1
(1,136)	1:A:422:ILE:C	1:A:423:LYS:N	1:A:423:LYS:CA	1:A:423:LYS:C	2	1.1
(1,134)	1:A:398:VAL:C	1:A:399:ALA:N	1:A:399:ALA:CA	1:A:399:ALA:C	15	1.1
(1,133)	1:A:397:LYS:C	1:A:398:VAL:N	1:A:398:VAL:CA	1:A:398:VAL:C	3	1.1
(1,132)	1:A:396:VAL:C	1:A:397:LYS:N	1:A:397:LYS:CA	1:A:397:LYS:C	10	1.1
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	13	1.1
(1,130)	1:A:394:HIS:C	1:A:395:LEU:N	1:A:395:LEU:CA	1:A:395:LEU:C	16	1.1
(1,129)	1:A:393:ASN:C	1:A:394:HIS:N	1:A:394:HIS:CA	1:A:394:HIS:C	11	1.1
(1,126)	1:A:390:VAL:C	1:A:391:GLY:N	1:A:391:GLY:CA	1:A:391:GLY:C	15	1.1
(1,125)	1:A:389:LEU:C	1:A:390:VAL:N	1:A:390:VAL:CA	1:A:390:VAL:C	17	1.1
(1,123)	1:A:387:ASN:C	1:A:388:CYS:N	1:A:388:CYS:CA	1:A:388:CYS:C	5	1.1
(1,121)	1:A:385:ALA:C	1:A:386:ARG:N	1:A:386:ARG:CA	1:A:386:ARG:C	6	1.1
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	8	1.1
(1,12)	1:A:506:ALA:C	1:A:507:GLU:N	1:A:507:GLU:CA	1:A:507:GLU:C	8	1.1
(1,119)	1:A:383:LEU:C	1:A:384:ALA:N	1:A:384:ALA:CA	1:A:384:ALA:C	20	1.1
(1,116)	1:A:380:HIS:C	1:A:381:ARG:N	1:A:381:ARG:CA	1:A:381:ARG:C	9	1.1
(1,114)	1:A:378:PHE:C	1:A:379:ILE:N	1:A:379:ILE:CA	1:A:379:ILE:C	10	1.1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

<b>Key</b>	<b>Atom-1</b>	<b>Atom-2</b>	<b>Atom-3</b>	<b>Atom-4</b>	<b>Model ID</b>	<b>Violation (°)</b>
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	6	1.1
(1,109)	1:A:373:LEU:C	1:A:374:GLU:N	1:A:374:GLU:CA	1:A:374:GLU:C	12	1.1
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	8	1.1
(1,102)	1:A:366:ILE:C	1:A:367:SER:N	1:A:367:SER:CA	1:A:367:SER:C	13	1.1
(1,101)	1:A:365:GLN:C	1:A:366:ILE:N	1:A:366:ILE:CA	1:A:366:ILE:C	14	1.1
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	15	1.1
(1,1)	1:A:494:CYS:C	1:A:495:TRP:N	1:A:495:TRP:CA	1:A:495:TRP:C	15	1.1