



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 07:38 PM EDT

PDB ID : 2N49
BMRB ID : 15843
Title : EC-NMR Structure of Erwinia carotovora ECA1580 N-terminal Domain Determined by Combining Evolutionary Couplings (EC) and Sparse NMR Data. Northeast Structural Genomics Consortium target EwR156A
Authors : Tang, Y.; Huang, Y.J.; Hopf, T.A.; Sander, C.; Marks, D.; Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)
Deposited on : 2015-06-17

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

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

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

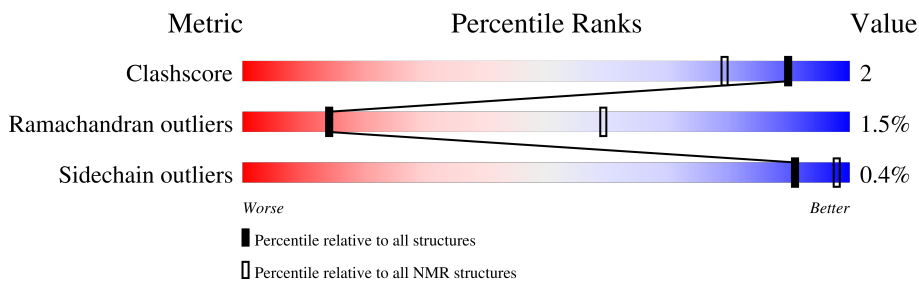
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 93%.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 74 | 84% 16% |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 12 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:4-A:65 (62) | 1.43 | 12 |

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

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

The models can be grouped into 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1165 atoms, of which 570 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Putative cold-shock protein.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|-----|-----|---|-------|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 74 | 1165 | 381 | 570 | 106 | 106 | 2 | 0 |

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

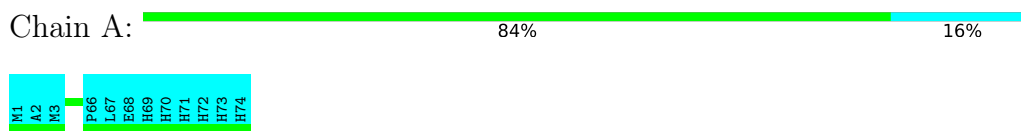
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A | 67 | LEU | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |
| A | 68 | GLU | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |
| A | 69 | HIS | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |
| A | 70 | HIS | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |
| A | 71 | HIS | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |
| A | 72 | HIS | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |
| A | 73 | HIS | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |
| A | 74 | HIS | - | expression tag | UNP Q6D6V0 |

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: Putative cold-shock protein

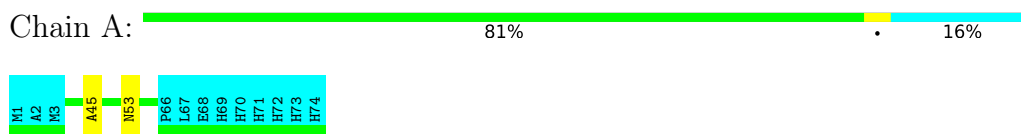


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

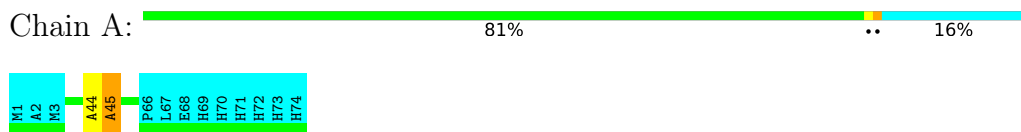
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



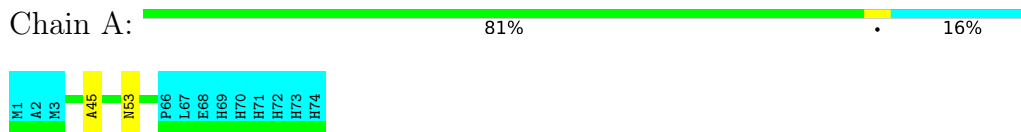
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



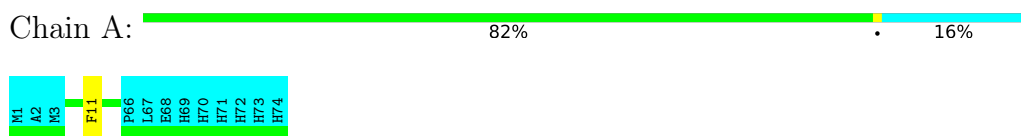
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



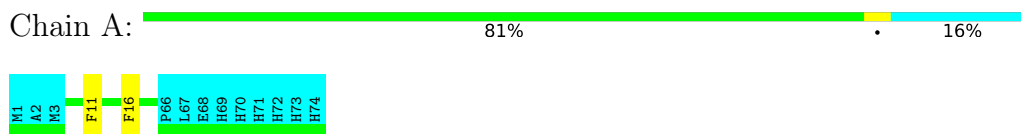
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



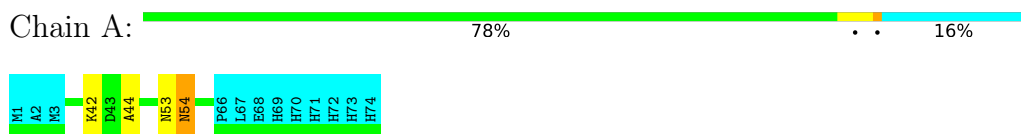
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



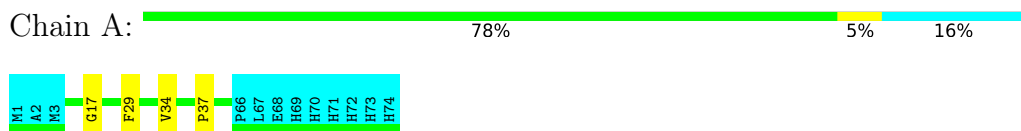
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



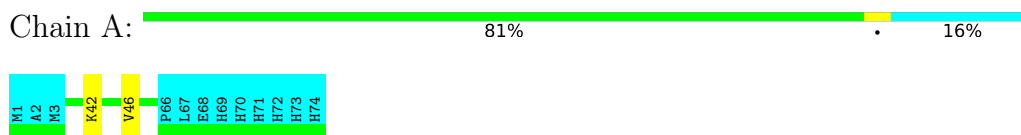
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



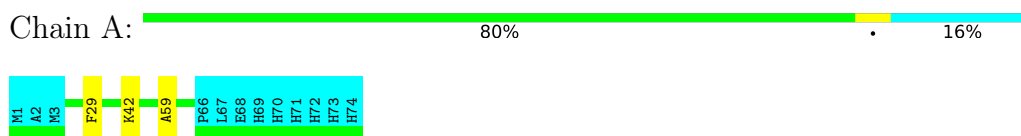
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



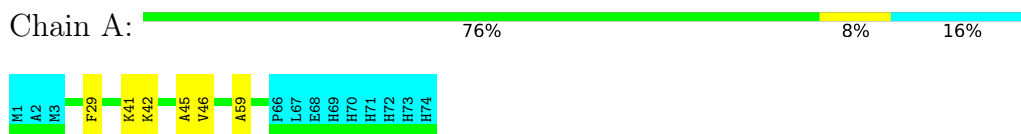
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



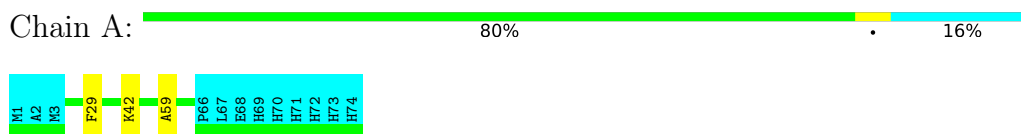
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



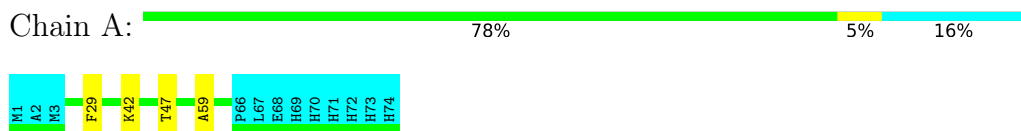
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



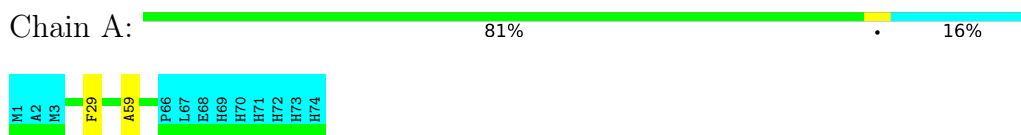
4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



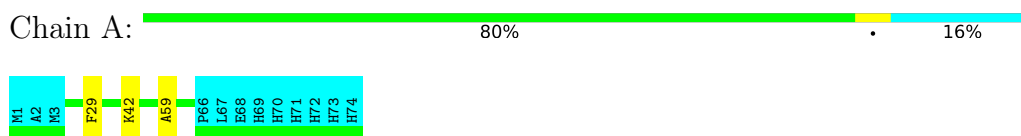
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



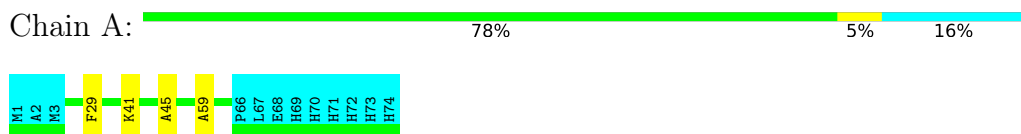
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



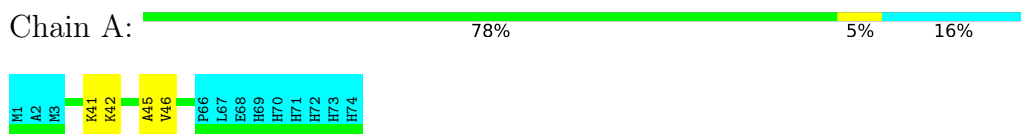
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



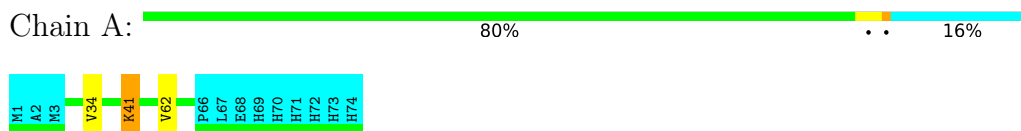
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



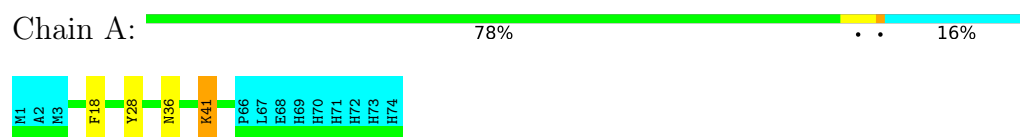
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



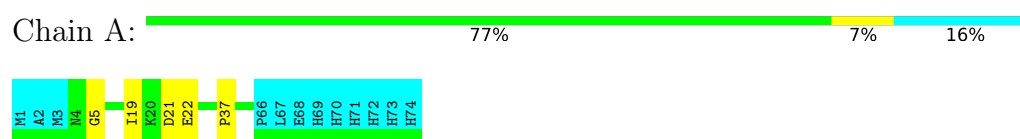
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



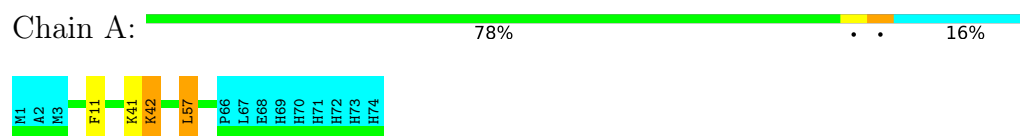
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Putative cold-shock protein



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|----------------|---------|
| Rosetta | refinement | |
| Reduce | refinement | |

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

| | |
|--|----------------|
| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 854 |
| Number of shifts mapped to atoms | 854 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 93% |

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

| Mol | Chain | Chirality | Planarity |
|-----|-------|-----------|-----------|
| 1 | A | 0.0±0.0 | 0.1±0.2 |
| All | All | 0 | 1 |

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|---------|----------------|
| 1 | A | 47 | THR | Peptide | 1 |

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1 | A | 489 | 485 | 486 | 2±1 |
| All | All | 9780 | 9700 | 9720 | 34 |

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

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|----------------|----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:29:PHE:HB3 | 1:A:59:ALA:HB3 | 0.92 | 1.41 | 14 | 7 |
| 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:O | 0.82 | 1.74 | 17 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:41:LYS:O | 1:A:41:LYS:CD | 0.69 | 2.41 | 17 | 2 |
| 1:A:57:LEU:H | 1:A:57:LEU:HD13 | 0.64 | 1.51 | 20 | 1 |
| 1:A:11:PHE:CD2 | 1:A:11:PHE:O | 0.63 | 2.52 | 20 | 3 |
| 1:A:17:GLY:HA3 | 1:A:29:PHE:CZ | 0.58 | 2.33 | 7 | 1 |
| 1:A:41:LYS:O | 1:A:41:LYS:CG | 0.52 | 2.58 | 18 | 1 |
| 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:16:PHE:O | 0.51 | 2.05 | 5 | 1 |
| 1:A:5:GLY:HA3 | 1:A:19:ILE:HD11 | 0.51 | 1.81 | 19 | 1 |
| 1:A:34:VAL:O | 1:A:37:PRO:HD3 | 0.50 | 2.06 | 7 | 1 |
| 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:HD22 | 0.49 | 2.22 | 20 | 1 |
| 1:A:29:PHE:CB | 1:A:59:ALA:HB3 | 0.48 | 2.35 | 13 | 3 |
| 1:A:34:VAL:HG13 | 1:A:62:VAL:HB | 0.47 | 1.86 | 17 | 1 |
| 1:A:53:ASN:O | 1:A:54:ASN:HB2 | 0.46 | 2.11 | 6 | 1 |
| 1:A:41:LYS:O | 1:A:45:ALA:HB2 | 0.45 | 2.10 | 16 | 3 |
| 1:A:44:ALA:O | 1:A:45:ALA:HB2 | 0.45 | 2.12 | 2 | 1 |
| 1:A:21:ASP:OD1 | 1:A:22:GLU:N | 0.44 | 2.50 | 19 | 1 |
| 1:A:41:LYS:O | 1:A:42:LYS:HB2 | 0.43 | 2.13 | 20 | 1 |
| 1:A:42:LYS:C | 1:A:44:ALA:N | 0.42 | 2.72 | 6 | 1 |
| 1:A:18:PHE:CE2 | 1:A:28:TYR:HB3 | 0.41 | 2.51 | 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 | 62/74 (84%) | 59±1 (96±2%) | 2±1 (3±2%) | 1±1 (1±1%) | 14 59 |
| All | All | 1240/1480 (84%) | 1185 (96%) | 37 (3%) | 18 (1%) | 14 59 |

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 | 42 | LYS | 8 |
| 1 | A | 45 | ALA | 3 |
| 1 | A | 46 | VAL | 3 |
| 1 | A | 53 | ASN | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 54 | ASN | 1 |
| 1 | A | 37 | PRO | 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 | 52/63 (83%) | 52±1 (100±1%) | 0±1 (0±1%) | 91 | 98 |
| All | All | 1040/1260 (83%) | 1036 (100%) | 4 (0%) | 91 | 98 |

All 3 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 | 41 | LYS | 2 |
| 1 | A | 36 | ASN | 1 |
| 1 | A | 57 | LEU | 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 93% for the well-defined parts and 85% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping [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 | 854 |
| Number of shifts mapped to atoms | 854 |
| 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 |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 68 | 0.05 ± 0.36 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 63 | 0.24 ± 0.35 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 64 | 0.37 ± 0.41 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 63 | 0.45 ± 0.36 | 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 93%, i.e. 779 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 837. 0 out of 8 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|---------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 305/311 (98%) | 126/127 (99%) | 120/124 (97%) | 59/60 (98%) |
| Sidechain | 410/440 (93%) | 279/284 (98%) | 125/139 (90%) | 6/17 (35%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 64/86 (74%) | 39/43 (91%) | 24/42 (57%) | 1/1 (100%) |
| Overall | 779/837 (93%) | 444/454 (98%) | 269/305 (88%) | 66/78 (85%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 85%, i.e. 854 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1002. 0 out of 9 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 331/369 (90%) | 136/150 (91%) | 132/148 (89%) | 63/71 (89%) |
| Sidechain | 455/511 (89%) | 310/332 (93%) | 139/162 (86%) | 6/17 (35%) |
| Aromatic | 68/122 (56%) | 41/67 (61%) | 26/54 (48%) | 1/1 (100%) |
| Overall | 854/1002 (85%) | 487/549 (89%) | 297/364 (82%) | 70/89 (79%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

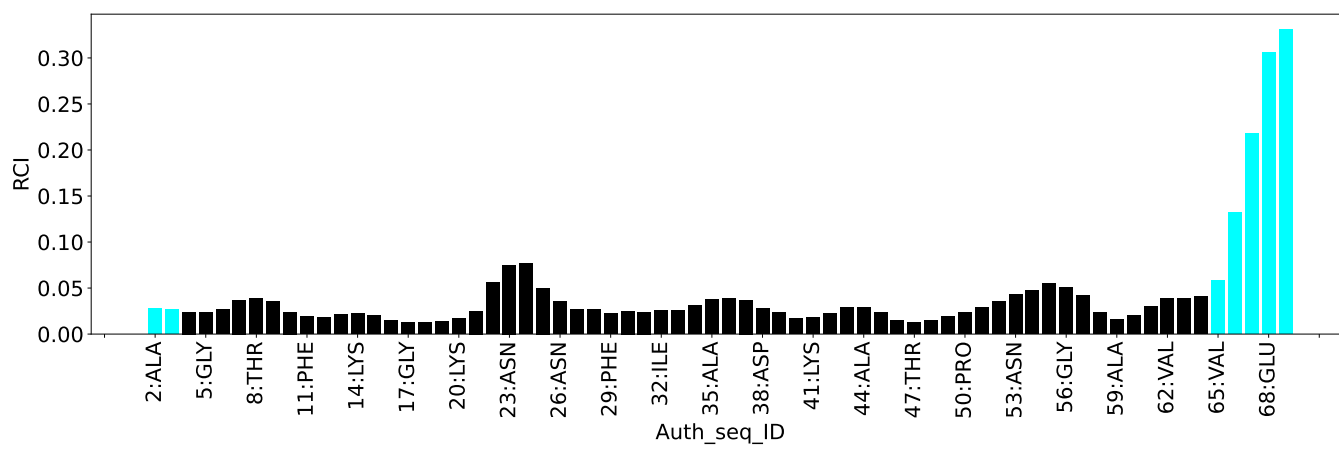
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 49 | GLU | HB2 | 0.23 | 1.00 – 3.05 | -8.7 |
| 1 | A | 40 | ILE | HG21 | -0.92 | -0.56 – 2.11 | -6.3 |
| 1 | A | 40 | ILE | HG22 | -0.92 | -0.56 – 2.11 | -6.3 |
| 1 | A | 40 | ILE | HG23 | -0.92 | -0.56 – 2.11 | -6.3 |

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 | 97 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 8 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 63 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 2 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 24 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 106 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 2.7 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 0.3 |

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

| Bins (Å) | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|--|---------|
| 0.1-0.2 (Small) | 0.1 | 0.19 |
| 0.2-0.5 (Medium) | None | None |
| >0.5 (Large) | None | None |

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) | 3.4 | 10.0 |
| 10.0-20.0 (Medium) | 3.4 | 19.7 |
| >20.0 (Large) | 98.7 | 179.4 |

9 Distance violation analysis

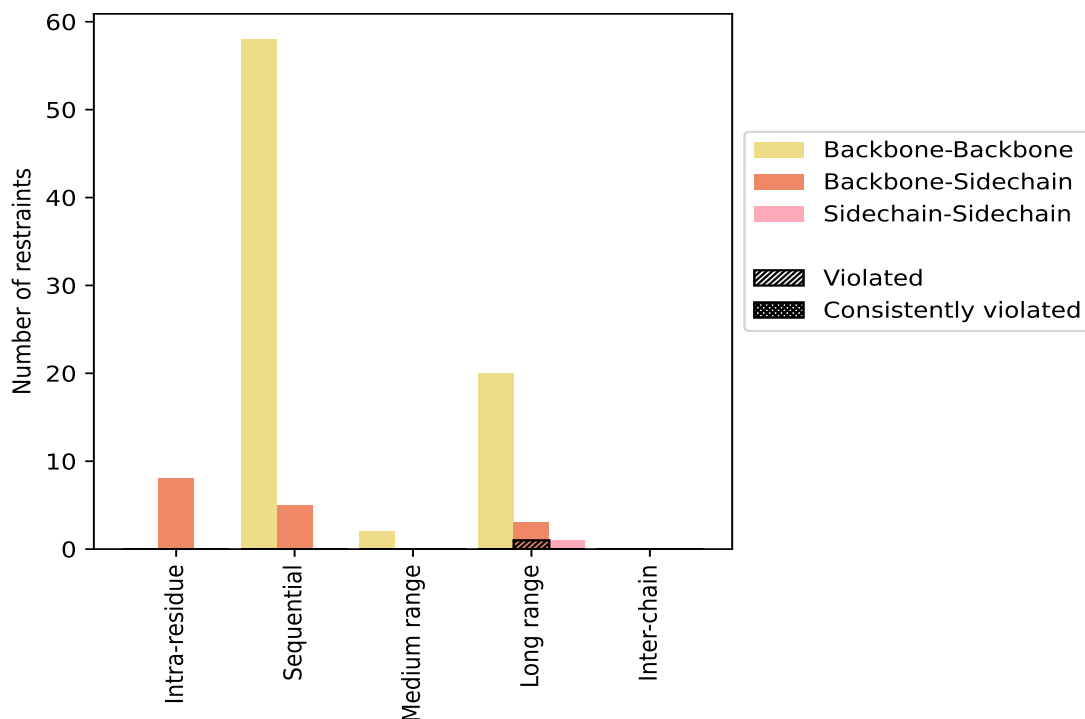
9.1 Summary of distance violations

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-----------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue (i-j =0) | 8 | 8.2 | 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 | 8 | 8.2 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sequential (i-j =1) | 63 | 64.9 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 58 | 59.8 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 5 | 5.2 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Medium range (i-j >1 & i-j <5) | 2 | 2.1 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 2 | 2.1 | 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 |
| Long range (i-j ≥5) | 24 | 24.7 | 1 | 4.2 | 1.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 20 | 20.6 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 3 | 3.1 | 1 | 33.3 | 1.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 1 | 1.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 97 | 100.0 | 1 | 1.0 | 1.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 80 | 82.5 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 16 | 16.5 | 1 | 6.2 | 1.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 1 | 1.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |

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

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



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

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

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

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0.19 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 8 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 10 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 11 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |

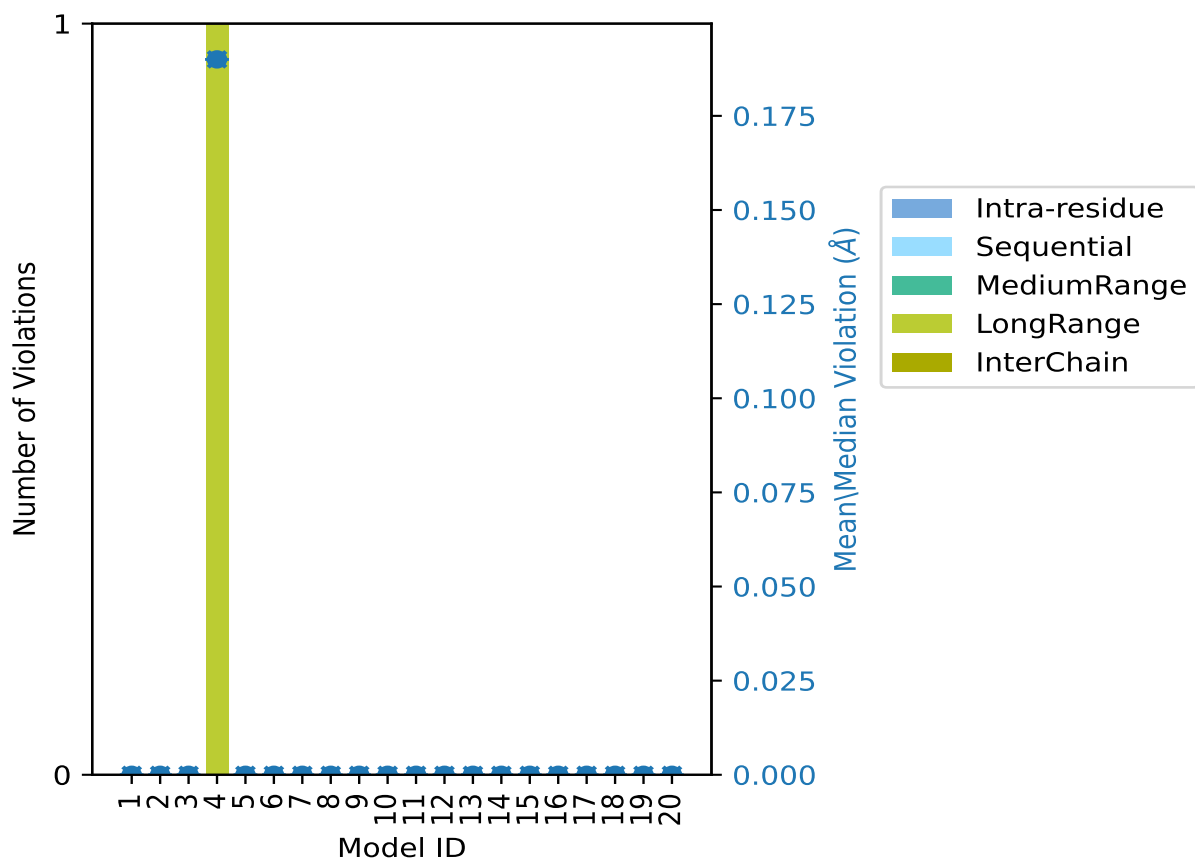
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 12 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 13 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 14 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 15 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 16 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 17 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 18 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 19 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 20 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |

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

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model [i](#)



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

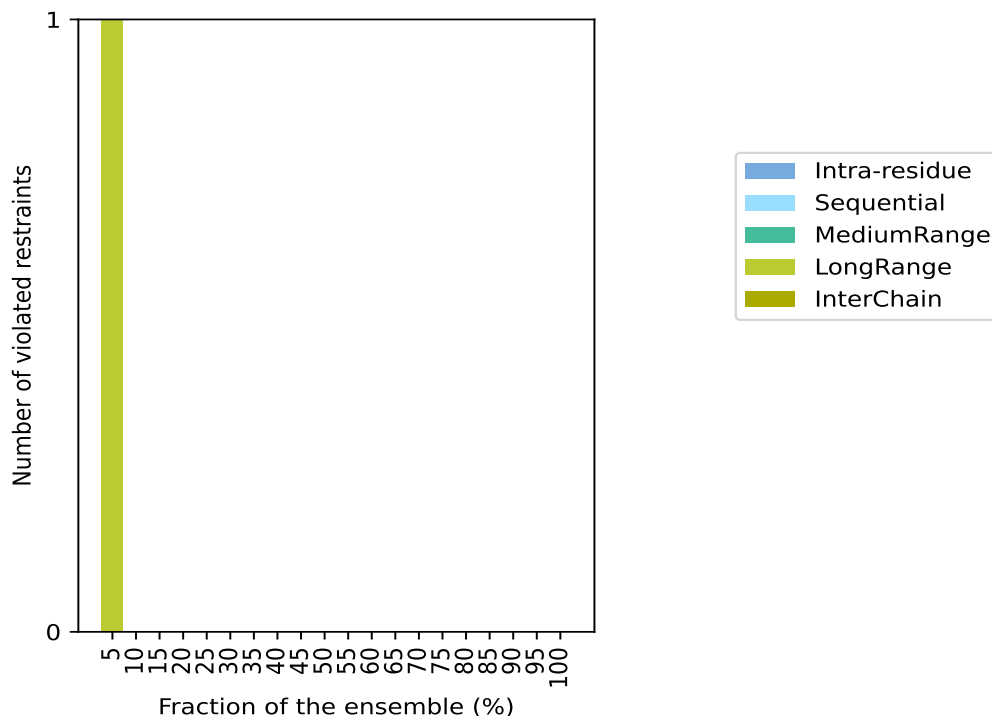
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 96(IR:8, SQ:63, MR:2, LR:23, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | Count ⁶ | % |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 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 | 0 | 0 | 0 | 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 | 0 | 0 | 0 | 0 | 11 | 55.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 12 | 60.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 13 | 65.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 14 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 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 | 0 | 0 | 0 | 19 | 95.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 20 | 100.0 |

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

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



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

No violations found

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.

Data insufficient to plot histogram

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) |
|--------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (3,36) | 1:A:36:ASN:HD21 | 1:A:64:VAL:H | 4 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (3,36) | 1:A:36:ASN:HD22 | 1:A:64:VAL:H | 4 | 0.19 |

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

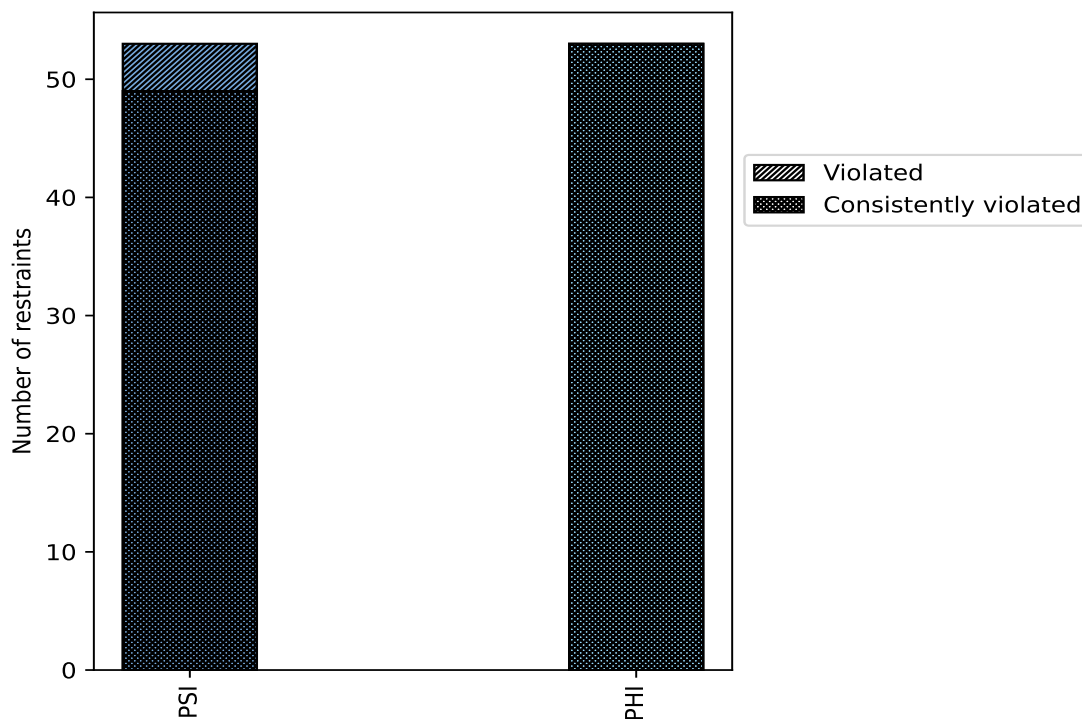
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

| Angle type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| PSI | 53 | 50.0 | 53 | 100.0 | 50.0 | 49 | 92.5 | 46.2 |
| PHI | 53 | 50.0 | 53 | 100.0 | 50.0 | 53 | 100.0 | 50.0 |
| Total | 106 | 100.0 | 106 | 100.0 | 100.0 | 102 | 96.2 | 96.2 |

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

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



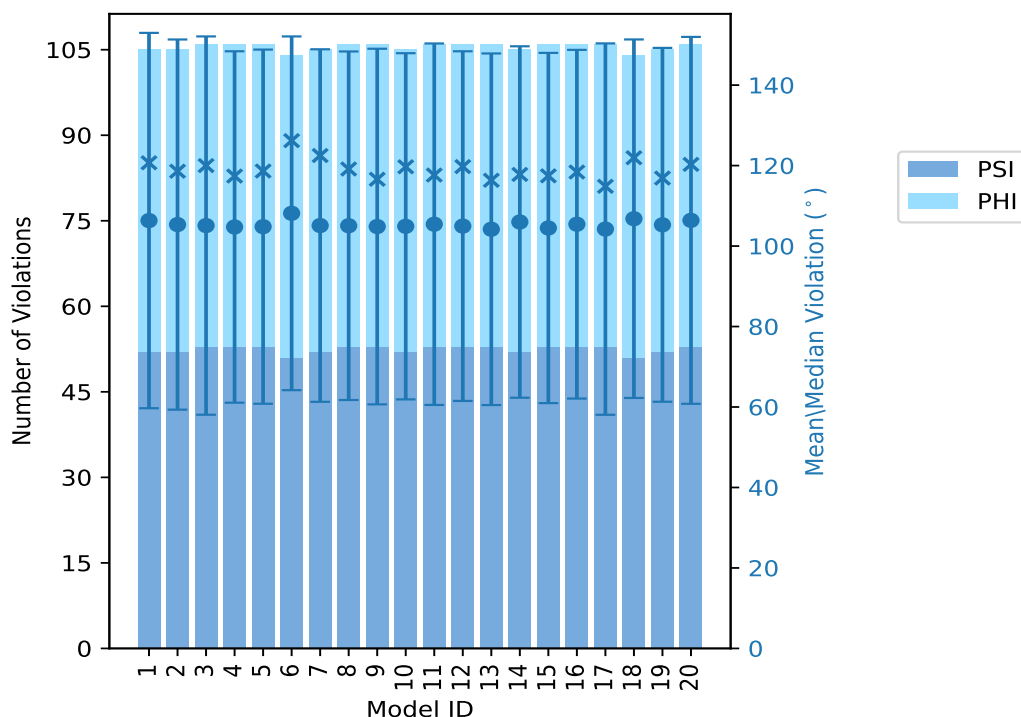
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

| Model ID | Number of violations | | | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
| | PSI | PHI | Total | | | | |
| 1 | 52 | 53 | 105 | 106.34 | 178.9 | 46.64 | 120.7 |
| 2 | 52 | 53 | 105 | 105.34 | 178.9 | 46.0 | 118.6 |
| 3 | 53 | 53 | 106 | 105.09 | 178.1 | 47.01 | 120.0 |
| 4 | 53 | 53 | 106 | 104.74 | 173.3 | 43.67 | 117.4 |
| 5 | 53 | 53 | 106 | 104.82 | 178.8 | 44.01 | 118.65 |
| 6 | 51 | 53 | 104 | 108.14 | 174.9 | 43.96 | 126.2 |
| 7 | 52 | 53 | 105 | 105.1 | 176.2 | 43.81 | 122.5 |
| 8 | 53 | 53 | 106 | 105.05 | 172.9 | 43.31 | 119.15 |
| 9 | 53 | 53 | 106 | 104.85 | 175.3 | 44.19 | 116.6 |
| 10 | 52 | 53 | 105 | 104.91 | 168.6 | 43.02 | 119.7 |
| 11 | 53 | 53 | 106 | 105.43 | 175.0 | 44.92 | 117.65 |
| 12 | 53 | 53 | 106 | 104.96 | 172.6 | 43.45 | 119.75 |
| 13 | 53 | 53 | 106 | 104.18 | 179.4 | 43.69 | 116.35 |
| 14 | 52 | 53 | 105 | 105.98 | 175.2 | 43.67 | 117.8 |
| 15 | 53 | 53 | 106 | 104.49 | 178.8 | 43.52 | 117.45 |
| 16 | 53 | 53 | 106 | 105.43 | 171.2 | 43.33 | 118.4 |
| 17 | 53 | 53 | 106 | 104.22 | 178.3 | 46.15 | 114.85 |
| 18 | 51 | 53 | 104 | 106.8 | 175.9 | 44.55 | 121.95 |
| 19 | 52 | 53 | 105 | 105.28 | 172.8 | 43.97 | 116.9 |
| 20 | 53 | 53 | 106 | 106.39 | 173.6 | 45.59 | 120.3 |

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

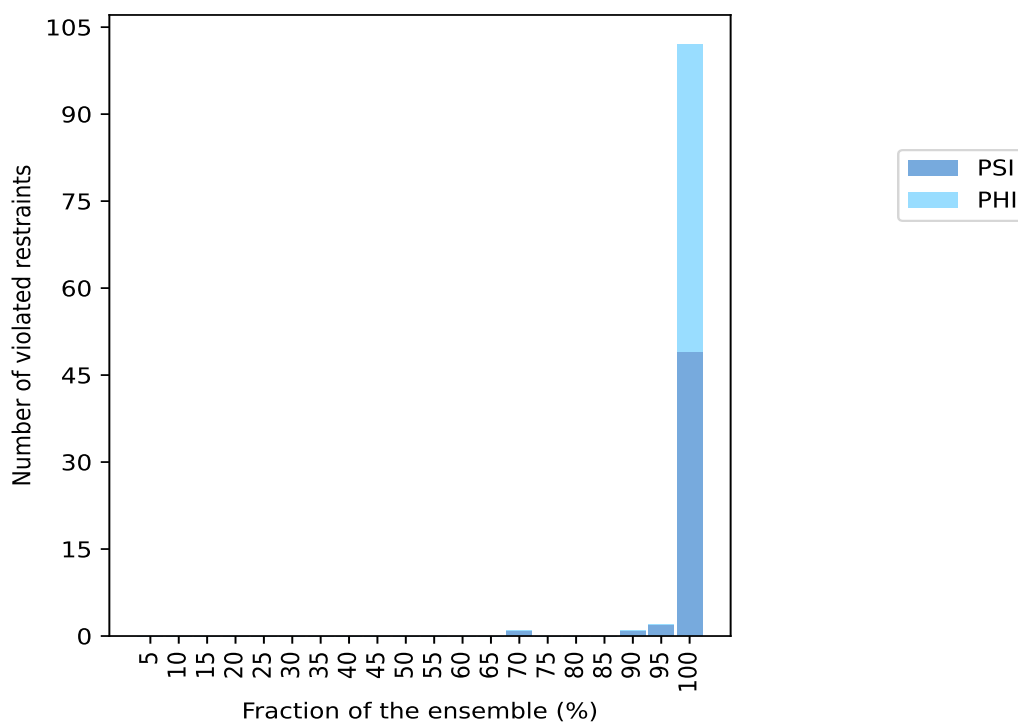
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PSI | PHI | Total | Count ¹ | % |
| 0 | 0 | 0 | 12 | 60.0 |
| 0 | 0 | 0 | 13 | 65.0 |
| 1 | 0 | 1 | 14 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 15 | 75.0 |
| 0 | 0 | 0 | 16 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 17 | 85.0 |
| 1 | 0 | 1 | 18 | 90.0 |
| 2 | 0 | 2 | 19 | 95.0 |
| 49 | 53 | 102 | 20 | 100.0 |

¹ Number of models with violations

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

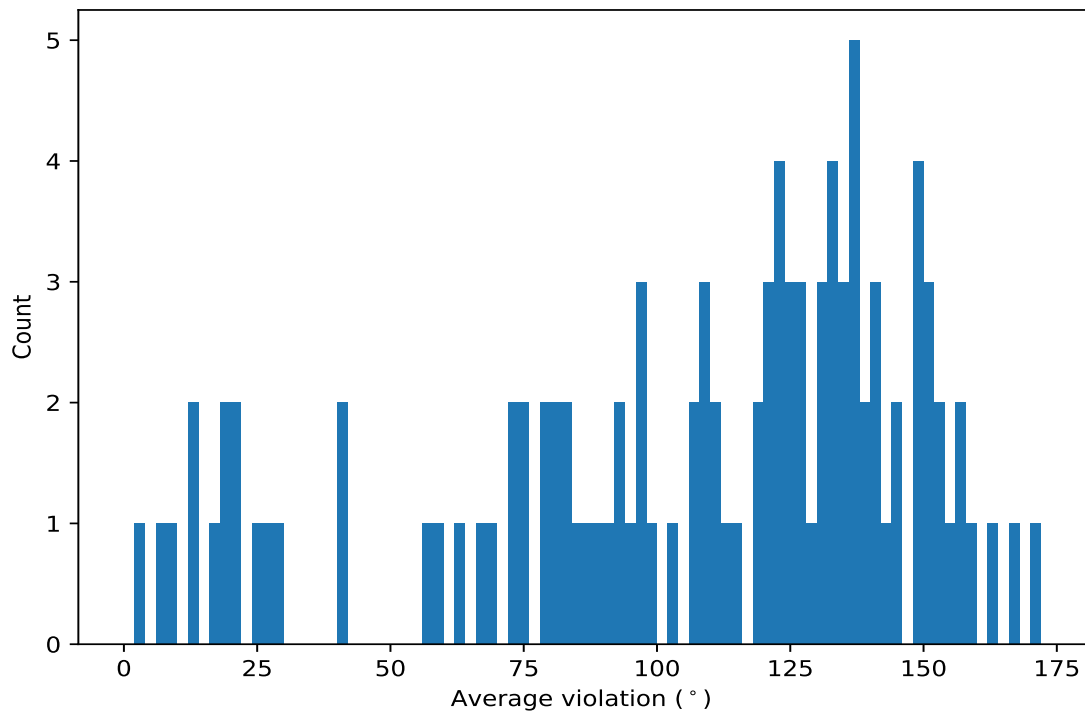


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 20 | 171.92 | 4.62 | 172.25 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 20 | 166.87 | 4.42 | 165.5 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 20 | 163.77 | 5.46 | 162.2 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 20 | 159.82 | 7.66 | 158.5 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 20 | 156.41 | 11.46 | 153.1 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 20 | 156.13 | 9.14 | 152.5 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 20 | 155.1 | 15.91 | 157.65 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 20 | 153.66 | 10.45 | 156.25 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 20 | 152.31 | 4.42 | 151.9 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 20 | 151.46 | 14.32 | 157.1 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 20 | 151.43 | 6.33 | 149.75 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 20 | 150.28 | 6.11 | 151.55 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 20 | 149.28 | 21.67 | 152.3 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 20 | 149.24 | 16.39 | 155.0 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 20 | 148.32 | 26.05 | 157.05 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 20 | 148.03 | 10.21 | 153.05 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 20 | 145.02 | 7.41 | 142.55 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 20 | 144.24 | 4.17 | 143.1 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 20 | 142.1 | 7.09 | 142.05 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 20 | 141.28 | 23.95 | 153.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 20 | 141.16 | 9.91 | 144.35 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 20 | 140.56 | 14.48 | 137.1 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 20 | 139.21 | 5.69 | 138.15 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 20 | 138.36 | 9.05 | 138.05 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 20 | 137.96 | 11.36 | 137.7 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 20 | 137.88 | 8.09 | 138.45 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 20 | 137.78 | 8.23 | 136.95 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 20 | 136.74 | 7.54 | 134.5 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 20 | 136.11 | 6.11 | 136.6 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 20 | 134.66 | 6.11 | 133.8 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 20 | 134.38 | 14.18 | 131.7 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 20 | 134.09 | 4.02 | 133.85 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 20 | 133.58 | 14.15 | 134.5 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 20 | 132.5 | 14.86 | 138.2 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 20 | 132.12 | 8.87 | 133.2 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 20 | 132.11 | 19.92 | 138.2 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 20 | 131.21 | 11.53 | 126.25 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 20 | 130.89 | 7.92 | 130.8 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 20 | 130.82 | 9.95 | 131.05 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 20 | 128.93 | 6.76 | 127.6 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 20 | 127.58 | 9.52 | 128.05 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 20 | 126.43 | 3.15 | 126.85 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 20 | 126.4 | 6.77 | 125.4 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 20 | 125.93 | 5.36 | 123.1 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 20 | 125.0 | 14.72 | 123.0 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 20 | 124.47 | 7.34 | 126.25 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 20 | 123.76 | 9.14 | 124.85 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 20 | 123.56 | 7.45 | 123.3 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 20 | 122.56 | 2.75 | 122.2 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 20 | 122.22 | 16.02 | 125.2 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 20 | 121.46 | 5.19 | 122.4 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 20 | 120.48 | 2.83 | 119.5 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 20 | 120.4 | 10.88 | 116.7 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 20 | 118.89 | 9.1 | 118.85 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 20 | 118.46 | 14.52 | 110.75 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 20 | 115.57 | 7.74 | 113.3 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 20 | 113.29 | 32.94 | 124.55 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 20 | 111.12 | 51.27 | 74.5 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 20 | 110.06 | 9.37 | 108.65 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 20 | 108.32 | 23.53 | 111.8 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 20 | 108.14 | 10.86 | 112.1 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 20 | 108.06 | 7.72 | 105.25 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 20 | 107.78 | 26.85 | 124.15 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 20 | 106.2 | 34.62 | 80.5 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 20 | 102.77 | 6.07 | 102.35 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 20 | 98.34 | 4.36 | 97.9 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 20 | 97.62 | 7.78 | 96.9 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 20 | 96.77 | 7.66 | 95.95 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 20 | 96.07 | 5.6 | 94.9 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 20 | 95.62 | 3.44 | 95.75 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 20 | 92.28 | 11.87 | 86.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

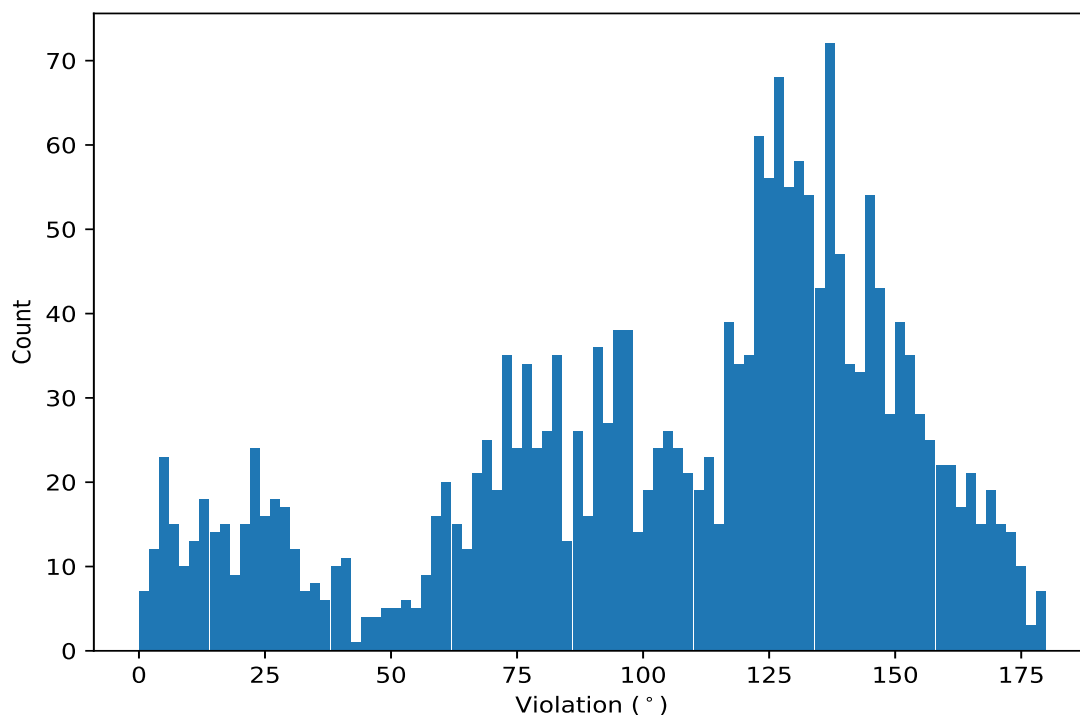
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 20 | 92.12 | 1.66 | 91.75 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 20 | 91.09 | 14.46 | 94.8 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 20 | 89.51 | 6.05 | 92.2 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 20 | 87.8 | 5.15 | 89.0 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 20 | 85.67 | 7.75 | 84.85 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 20 | 83.58 | 3.38 | 82.8 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 20 | 82.38 | 6.22 | 83.5 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 20 | 81.48 | 20.45 | 89.65 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 20 | 80.28 | 11.12 | 82.6 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 20 | 78.52 | 5.73 | 76.95 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 20 | 78.51 | 9.84 | 81.65 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 20 | 74.95 | 3.26 | 74.85 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 20 | 74.04 | 10.1 | 72.05 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 20 | 73.2 | 1.88 | 73.55 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 20 | 72.4 | 4.4 | 74.0 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 20 | 68.22 | 2.4 | 67.75 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 20 | 66.9 | 3.73 | 68.1 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 20 | 62.96 | 3.62 | 61.6 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 20 | 58.13 | 4.45 | 58.6 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 20 | 57.13 | 3.38 | 57.85 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 20 | 41.84 | 11.66 | 39.35 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 20 | 41.57 | 3.28 | 41.2 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 20 | 28.72 | 3.22 | 28.8 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 20 | 27.92 | 6.83 | 29.5 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 20 | 24.81 | 4.9 | 23.05 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 20 | 20.6 | 10.74 | 27.0 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 20 | 20.44 | 6.03 | 17.4 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 20 | 19.71 | 5.77 | 20.05 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 20 | 18.23 | 4.04 | 19.35 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 20 | 12.0 | 7.87 | 9.8 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 20 | 9.78 | 3.0 | 10.55 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 19 | 17.71 | 10.54 | 20.6 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 19 | 13.03 | 7.45 | 13.9 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 18 | 7.95 | 6.48 | 5.3 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 14 | 3.91 | 1.64 | 4.0 |

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

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

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 13 | 179.4 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 2 | 178.9 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1 | 178.9 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 15 | 178.8 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 5 | 178.8 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 17 | 178.3 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 3 | 178.1 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 2 | 177.4 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 3 | 176.4 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 7 | 176.2 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 18 | 175.9 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1 | 175.3 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 9 | 175.3 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1 | 175.3 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 14 | 175.2 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 11 | 175.0 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 3 | 174.9 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 6 | 174.9 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 9 | 174.5 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 2 | 174.4 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 20 | 173.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 5 | 173.5 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1 | 173.5 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 14 | 173.3 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 4 | 173.3 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 3 | 173.1 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 9 | 173.1 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 8 | 172.9 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 19 | 172.8 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 11 | 172.8 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 19 | 172.7 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 19 | 172.6 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 12 | 172.6 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 6 | 172.5 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 11 | 171.8 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 12 | 171.7 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 13 | 171.5 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 6 | 171.3 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 14 | 171.2 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 16 | 171.2 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 20 | 170.8 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 11 | 170.8 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 8 | 170.7 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 18 | 170.6 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 14 | 170.5 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1 | 170.4 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 9 | 170.4 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 20 | 170.4 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 17 | 170.3 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 2 | 169.8 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 4 | 169.7 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 12 | 169.6 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 15 | 169.5 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 17 | 169.3 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 17 | 169.3 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 17 | 169.2 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 13 | 169.0 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 18 | 169.0 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 12 | 168.9 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 4 | 168.9 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 16 | 168.7 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 2 | 168.6 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 10 | 168.6 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 4 | 168.4 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 3 | 168.3 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 18 | 168.3 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 4 | 168.1 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 20 | 168.1 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 13 | 167.6 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 20 | 167.5 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 16 | 167.1 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 14 | 167.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 16 | 167.0 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 19 | 166.8 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 5 | 166.8 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 15 | 166.6 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 16 | 166.4 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 18 | 166.4 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 2 | 166.3 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 3 | 166.3 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 12 | 166.3 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 15 | 166.2 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 10 | 166.1 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 7 | 165.9 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 20 | 165.8 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 5 | 165.6 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 17 | 165.6 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 12 | 165.6 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 8 | 165.5 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 15 | 165.4 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1 | 165.3 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 2 | 165.2 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 15 | 165.2 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1 | 165.2 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 19 | 165.2 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 12 | 165.0 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 6 | 165.0 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 7 | 165.0 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 20 | 164.9 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 8 | 164.9 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 17 | 164.9 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 20 | 164.6 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 4 | 164.2 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 20 | 164.0 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 6 | 163.9 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1 | 163.5 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 13 | 163.5 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 6 | 163.4 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 18 | 163.4 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 1 | 163.3 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 9 | 163.2 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 8 | 163.0 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 8 | 162.9 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 17 | 162.9 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 11 | 162.9 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 5 | 162.8 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 11 | 162.8 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 9 | 162.6 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 14 | 162.6 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 16 | 162.5 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 8 | 162.1 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 8 | 161.5 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 19 | 161.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 2 | 161.2 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 10 | 161.2 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 13 | 161.2 |
| (1,80) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 7 | 161.1 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 5 | 161.0 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 4 | 160.9 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1 | 160.9 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 3 | 160.8 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 10 | 160.8 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 18 | 160.7 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 15 | 160.6 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 8 | 160.5 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 4 | 160.2 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 6 | 160.2 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 8 | 160.2 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 10 | 160.1 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 16 | 160.1 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 15 | 160.1 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1 | 160.0 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 7 | 160.0 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 6 | 159.8 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 20 | 159.8 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 20 | 159.7 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 13 | 159.7 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 5 | 159.6 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 9 | 159.5 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 4 | 159.4 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 7 | 159.4 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 20 | 159.4 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 19 | 159.3 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 11 | 159.0 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 6 | 159.0 |
| (1,6) | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 19 | 158.8 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 2 | 158.7 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 2 | 158.6 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 3 | 158.4 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 6 | 158.4 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 2 | 158.3 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 14 | 158.3 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 15 | 158.1 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1 | 158.0 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 10 | 158.0 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 16 | 157.7 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 8 | 157.6 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 13 | 157.5 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 7 | 157.5 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 16 | 157.4 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 16 | 157.4 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 13 | 157.3 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 18 | 157.3 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 10 | 157.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 14 | 157.2 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 3 | 157.2 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 6 | 157.2 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 11 | 157.2 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 19 | 156.9 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 13 | 156.8 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 15 | 156.8 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 19 | 156.8 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 11 | 156.7 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 17 | 156.7 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 8 | 156.6 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 14 | 156.6 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 18 | 156.4 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 14 | 156.4 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1 | 156.2 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 19 | 156.2 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 9 | 155.8 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 12 | 155.8 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 2 | 155.8 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 5 | 155.8 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 17 | 155.8 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 19 | 155.8 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 11 | 155.7 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 10 | 155.7 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 4 | 155.7 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 9 | 155.6 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 7 | 155.4 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 10 | 155.2 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 17 | 155.2 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 3 | 155.1 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 5 | 154.9 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 3 | 154.8 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 18 | 154.8 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 12 | 154.7 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 5 | 154.5 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 18 | 154.5 |
| (1,94) | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 3 | 154.4 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 13 | 154.3 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 9 | 154.3 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 20 | 154.2 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 10 | 154.2 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 11 | 154.2 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 13 | 154.2 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 4 | 154.0 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 11 | 153.9 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 14 | 153.9 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 6 | 153.9 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 7 | 153.8 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 2 | 153.8 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 17 | 153.7 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 18 | 153.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 2 | 153.5 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 7 | 153.5 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 18 | 153.4 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 7 | 153.3 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 18 | 153.2 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 14 | 153.2 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1 | 153.2 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 1 | 153.0 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 10 | 152.9 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 19 | 152.9 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 4 | 152.8 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 9 | 152.7 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 8 | 152.7 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 20 | 152.7 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 10 | 152.7 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 11 | 152.7 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1 | 152.6 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 11 | 152.5 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 11 | 152.3 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 18 | 152.3 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 6 | 152.3 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1 | 152.3 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 10 | 152.2 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 3 | 152.2 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 15 | 152.1 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 14 | 152.0 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 9 | 152.0 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 18 | 152.0 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 7 | 151.9 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 15 | 151.9 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 19 | 151.9 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 12 | 151.9 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 3 | 151.9 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 20 | 151.9 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 17 | 151.9 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 14 | 151.8 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 20 | 151.8 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 17 | 151.8 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 17 | 151.8 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 18 | 151.8 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 3 | 151.6 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 11 | 151.6 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 17 | 151.5 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 11 | 151.5 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 14 | 151.5 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 16 | 151.4 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 5 | 151.3 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 17 | 151.3 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 7 | 151.3 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 2 | 151.1 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 11 | 151.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 12 | 151.0 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 18 | 150.9 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 9 | 150.8 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 16 | 150.7 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 3 | 150.6 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 2 | 150.6 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 9 | 150.5 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 8 | 150.5 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 20 | 150.5 |
| (1,84) | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 7 | 150.4 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 3 | 150.3 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 14 | 150.2 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 5 | 150.2 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 12 | 150.1 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 15 | 150.0 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 19 | 150.0 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 10 | 149.9 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 6 | 149.8 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 9 | 149.7 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 16 | 149.7 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 5 | 149.7 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 14 | 149.6 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 13 | 149.6 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1 | 149.6 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 9 | 149.5 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 17 | 149.5 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 7 | 149.5 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 18 | 149.4 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 11 | 149.3 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 1 | 149.2 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 14 | 149.0 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 3 | 148.9 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 18 | 148.8 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 11 | 148.7 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 10 | 148.6 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 3 | 148.5 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 16 | 148.5 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 20 | 148.3 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 11 | 148.2 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 8 | 148.2 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 15 | 148.2 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 8 | 148.2 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 9 | 148.1 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 12 | 148.0 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 18 | 147.8 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 13 | 147.8 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 20 | 147.7 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 13 | 147.6 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 15 | 147.6 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 4 | 147.5 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 11 | 147.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 18 | 147.3 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 14 | 147.3 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 6 | 147.3 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 2 | 147.3 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 12 | 147.3 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 7 | 147.2 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 9 | 147.2 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 9 | 147.2 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 2 | 147.0 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 11 | 147.0 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 11 | 147.0 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 20 | 147.0 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1 | 146.9 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 4 | 146.9 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 2 | 146.9 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 9 | 146.8 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 8 | 146.8 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 3 | 146.8 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 12 | 146.7 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 16 | 146.6 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 2 | 146.6 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 5 | 146.5 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 15 | 146.5 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 9 | 146.4 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 13 | 146.4 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 17 | 146.3 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 6 | 146.3 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 14 | 146.2 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 2 | 146.2 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 5 | 146.2 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 1 | 146.1 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 17 | 146.1 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 15 | 146.0 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 4 | 146.0 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 8 | 146.0 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 3 | 146.0 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1 | 145.9 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 17 | 145.8 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 13 | 145.7 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 3 | 145.7 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 19 | 145.6 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 15 | 145.6 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 20 | 145.6 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 14 | 145.5 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 20 | 145.5 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 11 | 145.5 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 6 | 145.5 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 15 | 145.5 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 19 | 145.4 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 18 | 145.4 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 12 | 145.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 16 | 145.4 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 6 | 145.3 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 5 | 145.3 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 12 | 145.2 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 19 | 145.2 |
| (1,79) | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 12 | 145.1 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 2 | 145.1 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 13 | 145.1 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 13 | 145.1 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 13 | 145.0 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 16 | 145.0 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 17 | 144.9 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 6 | 144.8 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 5 | 144.8 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 19 | 144.8 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 6 | 144.8 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 9 | 144.8 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 7 | 144.8 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 5 | 144.8 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 13 | 144.7 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 4 | 144.7 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1 | 144.7 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 6 | 144.7 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 9 | 144.6 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 15 | 144.6 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 8 | 144.6 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 17 | 144.5 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 14 | 144.5 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 16 | 144.5 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 19 | 144.4 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 18 | 144.4 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 9 | 144.4 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 20 | 144.3 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 17 | 144.2 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 18 | 144.1 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1 | 144.1 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 13 | 144.1 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 7 | 144.0 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 8 | 144.0 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 5 | 143.9 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 17 | 143.9 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 18 | 143.8 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 7 | 143.7 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 16 | 143.7 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 14 | 143.6 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 2 | 143.5 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 4 | 143.5 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 15 | 143.4 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1 | 143.4 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1 | 143.4 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 4 | 143.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 6 | 143.2 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 12 | 143.1 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 15 | 143.0 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 10 | 142.8 |
| (1,4) | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 17 | 142.8 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 3 | 142.8 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 12 | 142.7 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 10 | 142.5 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 7 | 142.5 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1 | 142.4 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 14 | 142.4 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1 | 142.4 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1 | 142.4 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 5 | 142.2 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 3 | 142.2 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 6 | 142.1 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 3 | 142.1 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 3 | 142.1 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 16 | 142.1 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 12 | 142.0 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 15 | 142.0 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 4 | 141.9 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 10 | 141.9 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 20 | 141.8 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 19 | 141.8 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 17 | 141.8 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 3 | 141.7 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 2 | 141.7 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 20 | 141.7 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 19 | 141.7 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 4 | 141.6 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 20 | 141.6 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 18 | 141.6 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 17 | 141.5 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 16 | 141.4 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 18 | 141.4 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 10 | 141.3 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 6 | 141.2 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 6 | 141.2 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 20 | 141.1 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 13 | 141.0 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 12 | 141.0 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 6 | 140.7 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 1 | 140.7 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 13 | 140.7 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 5 | 140.6 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 8 | 140.6 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 5 | 140.5 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 19 | 140.4 |
| (1,98) | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 1:A:61:ALA:N | 13 | 140.3 |
| (1,28) | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 4 | 140.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 9 | 140.1 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 16 | 140.1 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 16 | 140.0 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 7 | 140.0 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 11 | 139.9 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 7 | 139.8 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 7 | 139.8 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 2 | 139.7 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 10 | 139.7 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 18 | 139.6 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 3 | 139.5 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 5 | 139.5 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 6 | 139.5 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 10 | 139.5 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1 | 139.5 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 19 | 139.4 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 13 | 139.4 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 15 | 139.4 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 15 | 139.4 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 14 | 139.4 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 3 | 139.3 |
| (1,52) | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 16 | 139.3 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 3 | 139.3 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 4 | 139.2 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 16 | 139.2 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 2 | 139.2 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 10 | 139.1 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 14 | 139.1 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 10 | 139.0 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 7 | 139.0 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 10 | 139.0 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 13 | 138.9 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 7 | 138.9 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 16 | 138.9 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 10 | 138.8 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 19 | 138.8 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 16 | 138.6 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 20 | 138.6 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 2 | 138.6 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 14 | 138.6 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 16 | 138.5 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 8 | 138.5 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 6 | 138.5 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 2 | 138.4 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 11 | 138.4 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 15 | 138.3 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 19 | 138.1 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 12 | 138.0 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 6 | 138.0 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 18 | 138.0 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 12 | 138.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 7 | 137.9 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 4 | 137.9 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 6 | 137.9 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 19 | 137.8 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 7 | 137.8 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 9 | 137.8 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 15 | 137.7 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 20 | 137.6 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 19 | 137.6 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 19 | 137.6 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 20 | 137.5 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 14 | 137.5 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 12 | 137.4 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 13 | 137.4 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 16 | 137.4 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 8 | 137.4 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 15 | 137.3 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1 | 137.3 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 11 | 137.3 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 3 | 137.3 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 2 | 137.3 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1 | 137.2 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1 | 137.2 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 3 | 137.2 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1 | 137.2 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 7 | 137.1 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 17 | 137.1 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 7 | 137.1 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 12 | 137.0 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 7 | 137.0 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 5 | 137.0 |
| (1,2) | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 6 | 137.0 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 17 | 137.0 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 18 | 137.0 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 4 | 136.9 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 12 | 136.9 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 7 | 136.9 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 12 | 136.9 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 19 | 136.8 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 18 | 136.8 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 12 | 136.8 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 18 | 136.8 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 9 | 136.8 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 6 | 136.8 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 12 | 136.8 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 17 | 136.8 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 19 | 136.8 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 11 | 136.7 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 4 | 136.7 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 14 | 136.6 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 13 | 136.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 15 | 136.6 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 6 | 136.6 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 7 | 136.6 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 5 | 136.4 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 10 | 136.4 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 11 | 136.4 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 10 | 136.4 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 5 | 136.3 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 7 | 136.3 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 9 | 136.2 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 3 | 136.2 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 16 | 136.2 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 2 | 136.2 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 7 | 136.2 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 5 | 136.1 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 17 | 136.0 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 7 | 136.0 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 10 | 136.0 |
| (1,46) | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 10 | 136.0 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 12 | 136.0 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 2 | 136.0 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 11 | 135.9 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 4 | 135.8 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 3 | 135.8 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 4 | 135.8 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 1 | 135.7 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 3 | 135.7 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 16 | 135.6 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 10 | 135.6 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 10 | 135.6 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 2 | 135.6 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 20 | 135.5 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 18 | 135.4 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 6 | 135.4 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 9 | 135.3 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 4 | 135.3 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 4 | 135.2 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 8 | 135.2 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 3 | 135.2 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 15 | 135.2 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 8 | 135.1 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 19 | 135.0 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 5 | 134.9 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 12 | 134.9 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 3 | 134.9 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 8 | 134.8 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 3 | 134.8 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 6 | 134.8 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 12 | 134.7 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 7 | 134.7 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 12 | 134.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 5 | 134.7 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 5 | 134.6 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 10 | 134.5 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 8 | 134.4 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1 | 134.2 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 11 | 134.1 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 12 | 134.1 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 2 | 134.1 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 17 | 134.0 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 8 | 134.0 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 18 | 134.0 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 20 | 134.0 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 19 | 134.0 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 16 | 133.9 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 20 | 133.8 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 19 | 133.8 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 14 | 133.7 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 2 | 133.6 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 17 | 133.6 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 18 | 133.6 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 5 | 133.6 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 2 | 133.6 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 10 | 133.5 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 13 | 133.5 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 2 | 133.5 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 14 | 133.4 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 16 | 133.4 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 16 | 133.4 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 4 | 133.4 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 15 | 133.3 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 8 | 133.3 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 16 | 133.3 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 6 | 133.2 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 19 | 133.2 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 18 | 133.1 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 9 | 133.1 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 7 | 133.1 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 13 | 133.0 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 9 | 133.0 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 20 | 133.0 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1 | 132.9 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 19 | 132.9 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 6 | 132.8 |
| (1,83) | 1:A:50:PRO:C | 1:A:51:THR:N | 1:A:51:THR:CA | 1:A:51:THR:C | 20 | 132.8 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 15 | 132.8 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 20 | 132.8 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 15 | 132.6 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 4 | 132.6 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 10 | 132.6 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 10 | 132.6 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 6 | 132.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 16 | 132.4 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 9 | 132.4 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 6 | 132.3 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 2 | 132.3 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 7 | 132.2 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 17 | 132.2 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 10 | 132.2 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 8 | 132.2 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 5 | 132.2 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 9 | 132.1 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 17 | 132.1 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 2 | 132.1 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 2 | 132.1 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 13 | 132.0 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 7 | 132.0 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 6 | 132.0 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 2 | 131.9 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 14 | 131.8 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 7 | 131.8 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 13 | 131.8 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 11 | 131.7 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 9 | 131.7 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1 | 131.7 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 8 | 131.7 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 17 | 131.6 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 18 | 131.6 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 11 | 131.6 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 14 | 131.6 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 20 | 131.6 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 19 | 131.6 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 14 | 131.6 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 17 | 131.6 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 3 | 131.6 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 2 | 131.6 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 5 | 131.5 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 3 | 131.5 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 4 | 131.5 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 15 | 131.5 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 19 | 131.5 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 4 | 131.5 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 5 | 131.4 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 15 | 131.4 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 9 | 131.3 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 14 | 131.3 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 10 | 131.3 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 2 | 131.3 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 8 | 131.3 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 19 | 131.2 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 8 | 131.1 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 5 | 131.1 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 12 | 131.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 19 | 131.0 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 4 | 131.0 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 5 | 131.0 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1 | 130.9 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 6 | 130.8 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 19 | 130.8 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 12 | 130.8 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 18 | 130.7 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 5 | 130.7 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 17 | 130.7 |
| (1,11) | 1:A:8:THR:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 4 | 130.6 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 20 | 130.6 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 8 | 130.5 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 2 | 130.5 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 14 | 130.4 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 12 | 130.4 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1 | 130.3 |
| (1,30) | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 6 | 130.1 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 10 | 130.0 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 17 | 130.0 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 5 | 130.0 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 13 | 130.0 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 6 | 130.0 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 18 | 129.9 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 11 | 129.8 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 20 | 129.8 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 8 | 129.8 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 7 | 129.7 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 11 | 129.7 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 4 | 129.7 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 3 | 129.7 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 16 | 129.7 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 4 | 129.7 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 13 | 129.6 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 8 | 129.5 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 11 | 129.5 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 17 | 129.4 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 16 | 129.4 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 9 | 129.4 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 11 | 129.4 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 16 | 129.3 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 12 | 129.3 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 7 | 129.3 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 15 | 129.3 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 10 | 129.3 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 17 | 129.3 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 20 | 129.2 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 15 | 129.2 |
| (1,50) | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 20 | 129.1 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 9 | 129.1 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1 | 129.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 10 | 129.0 |
| (1,78) | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1:A:48:PHE:N | 1 | 128.9 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 11 | 128.9 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 8 | 128.8 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 11 | 128.8 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 7 | 128.8 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 6 | 128.8 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 8 | 128.7 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 14 | 128.7 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 8 | 128.7 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 15 | 128.7 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 14 | 128.7 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 11 | 128.7 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 6 | 128.7 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 9 | 128.6 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 3 | 128.6 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 9 | 128.6 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 18 | 128.5 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 6 | 128.5 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 9 | 128.5 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 5 | 128.4 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 6 | 128.4 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 14 | 128.4 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 4 | 128.2 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 16 | 128.1 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 17 | 128.0 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 9 | 128.0 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 6 | 127.9 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 5 | 127.9 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 13 | 127.9 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 12 | 127.9 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 7 | 127.8 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 12 | 127.8 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 16 | 127.7 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 4 | 127.7 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 5 | 127.7 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1 | 127.6 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 20 | 127.6 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 3 | 127.6 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 20 | 127.6 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 14 | 127.5 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 20 | 127.5 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 6 | 127.4 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 18 | 127.4 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 12 | 127.4 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 17 | 127.4 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 7 | 127.3 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 18 | 127.3 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 18 | 127.2 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 2 | 127.2 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 4 | 127.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 14 | 127.2 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 16 | 127.2 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 8 | 127.1 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 10 | 127.1 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 20 | 127.1 |
| (1,32) | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 13 | 127.1 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 7 | 127.1 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 14 | 127.0 |
| (1,8) | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 15 | 127.0 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 6 | 127.0 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 10 | 127.0 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 7 | 126.9 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 11 | 126.9 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 15 | 126.9 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 8 | 126.8 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 20 | 126.8 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 17 | 126.8 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 6 | 126.8 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 10 | 126.8 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 3 | 126.8 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 5 | 126.8 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 17 | 126.7 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 14 | 126.7 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 19 | 126.7 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 10 | 126.7 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 12 | 126.7 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 6 | 126.6 |
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 19 | 126.6 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 8 | 126.6 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 13 | 126.6 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 10 | 126.6 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 7 | 126.5 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 5 | 126.4 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 11 | 126.4 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 5 | 126.3 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 13 | 126.3 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 4 | 126.2 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 3 | 126.2 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 14 | 126.2 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 16 | 126.2 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 7 | 126.1 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 11 | 126.1 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 5 | 126.0 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 8 | 126.0 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 8 | 125.9 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 19 | 125.9 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 8 | 125.9 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 8 | 125.9 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 9 | 125.9 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 12 | 125.9 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 6 | 125.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 4 | 125.8 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 4 | 125.7 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 18 | 125.7 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 11 | 125.7 |
| (1,48) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 5 | 125.7 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 16 | 125.7 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 7 | 125.6 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 3 | 125.6 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 6 | 125.6 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 13 | 125.6 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 4 | 125.6 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 4 | 125.6 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 13 | 125.6 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 18 | 125.6 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 2 | 125.5 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 10 | 125.4 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 10 | 125.4 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 20 | 125.4 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 9 | 125.4 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 13 | 125.3 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 15 | 125.3 |
| (1,76) | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 7 | 125.2 |
| (1,92) | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 9 | 125.1 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 19 | 125.1 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 14 | 125.1 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 16 | 125.0 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 5 | 125.0 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 6 | 124.9 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 13 | 124.9 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 5 | 124.9 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 10 | 124.9 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 18 | 124.8 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 10 | 124.8 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 14 | 124.8 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 18 | 124.8 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 2 | 124.7 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 4 | 124.6 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 16 | 124.5 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 2 | 124.5 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 5 | 124.3 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 2 | 124.3 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 16 | 124.2 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 12 | 124.1 |
| (1,85) | 1:A:51:THR:C | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 19 | 124.1 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 20 | 124.1 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 6 | 124.1 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1 | 124.1 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 15 | 124.0 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 1 | 124.0 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 18 | 123.9 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 9 | 123.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 10 | 123.8 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 12 | 123.7 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 4 | 123.7 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1 | 123.6 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 17 | 123.6 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 11 | 123.5 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 7 | 123.4 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 9 | 123.4 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 9 | 123.3 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 8 | 123.2 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 10 | 123.2 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 14 | 123.2 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 19 | 123.2 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 11 | 123.2 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 12 | 123.0 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 12 | 123.0 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 5 | 122.9 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 2 | 122.9 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 11 | 122.9 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 3 | 122.8 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 4 | 122.8 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 17 | 122.8 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 9 | 122.8 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 8 | 122.8 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 2 | 122.6 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 20 | 122.6 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 3 | 122.6 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 18 | 122.6 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 13 | 122.6 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1 | 122.6 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 17 | 122.5 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 7 | 122.5 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1 | 122.5 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 11 | 122.5 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 4 | 122.5 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 9 | 122.5 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 11 | 122.5 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 18 | 122.5 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 17 | 122.4 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 18 | 122.4 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 6 | 122.4 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 9 | 122.4 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 12 | 122.4 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 20 | 122.4 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 14 | 122.4 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 10 | 122.4 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 20 | 122.4 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 11 | 122.3 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 14 | 122.3 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 15 | 122.2 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 5 | 122.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 12 | 122.2 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 4 | 122.1 |
| (1,12) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 20 | 122.1 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 3 | 122.1 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 13 | 122.1 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 15 | 122.1 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 9 | 122.0 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 17 | 122.0 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 15 | 121.9 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 2 | 121.8 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 19 | 121.8 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 1 | 121.8 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 16 | 121.8 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 3 | 121.6 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 14 | 121.6 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 18 | 121.5 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 13 | 121.5 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1 | 121.4 |
| (1,31) | 1:A:18:PHE:C | 1:A:19:ILE:N | 1:A:19:ILE:CA | 1:A:19:ILE:C | 16 | 121.4 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 3 | 121.4 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 16 | 121.3 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 18 | 121.3 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 6 | 121.1 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 8 | 121.1 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 3 | 121.0 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 16 | 121.0 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 18 | 120.9 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 8 | 120.8 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 5 | 120.8 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1 | 120.8 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 12 | 120.8 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 8 | 120.7 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 15 | 120.7 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 1 | 120.7 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 20 | 120.6 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 19 | 120.4 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 12 | 120.3 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 13 | 120.1 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 5 | 120.1 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 20 | 120.0 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 3 | 120.0 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 8 | 120.0 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 3 | 120.0 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 12 | 119.9 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 3 | 119.9 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 16 | 119.8 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 8 | 119.8 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 2 | 119.7 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 14 | 119.7 |
| (1,104) | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 10 | 119.7 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 12 | 119.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,86) | 1:A:52:THR:N | 1:A:52:THR:CA | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 20 | 119.5 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 1 | 119.4 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 14 | 119.3 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 15 | 119.2 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 3 | 119.0 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 11 | 119.0 |
| (1,96) | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 4 | 118.9 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 15 | 118.9 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 4 | 118.6 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 4 | 118.6 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 2 | 118.6 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 8 | 118.5 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 16 | 118.5 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 15 | 118.5 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 13 | 118.4 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 15 | 118.4 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 19 | 118.4 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 13 | 118.4 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 15 | 118.3 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 16 | 118.3 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 15 | 118.2 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 11 | 118.2 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 20 | 118.1 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 1 | 118.1 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 19 | 118.1 |
| (1,10) | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:THR:N | 7 | 118.0 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 9 | 117.8 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 14 | 117.8 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 19 | 117.6 |
| (1,34) | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1:A:21:ASP:N | 20 | 117.5 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 15 | 117.5 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 12 | 117.4 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 17 | 117.4 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 16 | 117.4 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 15 | 117.4 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 9 | 117.3 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 16 | 117.3 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 12 | 117.3 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 5 | 117.2 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 11 | 117.1 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 5 | 117.1 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 5 | 117.1 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 14 | 117.1 |
| (1,7) | 1:A:5:GLY:C | 1:A:6:THR:N | 1:A:6:THR:CA | 1:A:6:THR:C | 5 | 116.9 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 6 | 116.9 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 11 | 116.9 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 19 | 116.9 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 3 | 116.8 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 17 | 116.8 |
| (1,58) | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 2 | 116.8 |
| (1,5) | 1:A:4:ASN:C | 1:A:5:GLY:N | 1:A:5:GLY:CA | 1:A:5:GLY:C | 19 | 116.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 13 | 116.8 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 13 | 116.8 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 2 | 116.7 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 13 | 116.6 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 5 | 116.6 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 8 | 116.5 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 14 | 116.4 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 3 | 116.4 |
| (1,102) | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 13 | 116.4 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 13 | 116.3 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 4 | 116.2 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 1 | 116.2 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 10 | 116.1 |
| (1,106) | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1:A:66:PRO:N | 4 | 116.0 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 7 | 115.9 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 9 | 115.9 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 16 | 115.9 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 14 | 115.8 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 9 | 115.4 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 6 | 115.2 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 2 | 115.1 |
| (1,82) | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1:A:50:PRO:N | 12 | 115.0 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 1 | 115.0 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 9 | 114.9 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 11 | 114.6 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 8 | 114.5 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 14 | 114.4 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 10 | 114.3 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 15 | 114.2 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 13 | 113.8 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 15 | 113.6 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 15 | 113.6 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 5 | 113.4 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 6 | 113.4 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 20 | 113.4 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 18 | 113.2 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 8 | 113.2 |
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 13 | 113.1 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 17 | 112.9 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 16 | 112.8 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 10 | 112.7 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 20 | 112.7 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 18 | 112.7 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1 | 112.7 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 20 | 112.5 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 5 | 112.5 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 9 | 112.5 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 17 | 112.4 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 11 | 112.4 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 10 | 112.3 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 10 | 112.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,29) | 1:A:17:GLY:C | 1:A:18:PHE:N | 1:A:18:PHE:CA | 1:A:18:PHE:C | 19 | 112.2 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 13 | 111.9 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 8 | 111.8 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 4 | 111.6 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 4 | 111.5 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 14 | 111.5 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 15 | 111.4 |
| (1,27) | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 1:A:17:GLY:CA | 1:A:17:GLY:C | 4 | 111.1 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 13 | 111.0 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 16 | 110.9 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 9 | 110.9 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 20 | 110.8 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 12 | 110.7 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 11 | 110.6 |
| (1,95) | 1:A:58:SER:C | 1:A:59:ALA:N | 1:A:59:ALA:CA | 1:A:59:ALA:C | 5 | 110.5 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 12 | 110.5 |
| (1,97) | 1:A:59:ALA:C | 1:A:60:TYR:N | 1:A:60:TYR:CA | 1:A:60:TYR:C | 4 | 110.4 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 6 | 110.4 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 5 | 110.4 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 2 | 110.0 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 13 | 109.9 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 15 | 109.8 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 2 | 109.7 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 8 | 109.6 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 18 | 109.6 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 7 | 109.4 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 17 | 109.3 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 20 | 109.3 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 14 | 109.1 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 10 | 109.0 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 13 | 109.0 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 3 | 108.9 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 3 | 108.8 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 16 | 108.5 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 12 | 108.5 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 16 | 108.4 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 11 | 108.3 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 19 | 108.2 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 17 | 108.1 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 19 | 108.0 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 18 | 108.0 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 15 | 107.9 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 8 | 107.8 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 13 | 107.6 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 10 | 107.5 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 9 | 107.4 |
| (1,14) | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 7 | 107.4 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 2 | 107.3 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 3 | 107.2 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 11 | 107.1 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 7 | 107.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 19 | 107.0 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 17 | 106.8 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 9 | 106.7 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 14 | 106.7 |
| (1,44) | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1 | 106.6 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 3 | 106.6 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 8 | 106.4 |
| (1,45) | 1:A:26:ASN:C | 1:A:27:ARG:N | 1:A:27:ARG:CA | 1:A:27:ARG:C | 11 | 106.4 |
| (1,49) | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:PHE:N | 1:A:29:PHE:CA | 1:A:29:PHE:C | 20 | 106.3 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 4 | 106.3 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 6 | 106.1 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 17 | 106.1 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 15 | 106.0 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 4 | 106.0 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1 | 105.8 |
| (1,26) | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 1:A:17:GLY:N | 4 | 105.8 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 13 | 105.6 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 5 | 105.4 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 14 | 105.3 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 20 | 105.2 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 18 | 105.2 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 19 | 105.1 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 6 | 105.1 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 14 | 105.0 |
| (1,25) | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1:A:16:PHE:CA | 1:A:16:PHE:C | 7 | 105.0 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 12 | 105.0 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 19 | 104.9 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 17 | 104.9 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 15 | 104.9 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 2 | 104.9 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 9 | 104.8 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 8 | 104.7 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 11 | 104.5 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 17 | 104.4 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 14 | 104.4 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 17 | 104.3 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 11 | 104.3 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 8 | 104.2 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 16 | 104.2 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 11 | 104.0 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 16 | 103.9 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 6 | 103.9 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 2 | 103.9 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 16 | 103.7 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 1 | 103.7 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 6 | 103.7 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 20 | 103.6 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 9 | 103.5 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 10 | 103.5 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:MET:N | 1:A:3:MET:CA | 1:A:3:MET:C | 3 | 103.1 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 7 | 103.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 11 | 102.8 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 8 | 102.7 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 3 | 102.7 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 13 | 102.6 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 9 | 102.6 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 19 | 102.5 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 19 | 102.5 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 19 | 102.4 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 15 | 102.2 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 9 | 102.2 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 18 | 102.2 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 14 | 102.2 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 9 | 102.0 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 1 | 101.6 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 7 | 101.6 |
| (1,100) | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 7 | 101.6 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 11 | 101.5 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 1 | 101.4 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 19 | 101.2 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 2 | 101.2 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 14 | 101.1 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 10 | 101.1 |
| (1,51) | 1:A:29:PHE:C | 1:A:30:HIS:N | 1:A:30:HIS:CA | 1:A:30:HIS:C | 12 | 100.9 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1 | 100.9 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 14 | 100.8 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 2 | 100.8 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 18 | 100.6 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 10 | 100.2 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 4 | 100.2 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 5 | 100.2 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 10 | 100.1 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 16 | 100.0 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 4 | 99.1 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 2 | 99.1 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 17 | 99.1 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 7 | 99.0 |
| (1,101) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:LYS:N | 1:A:63:LYS:CA | 1:A:63:LYS:C | 7 | 99.0 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 6 | 98.9 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 1 | 98.8 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 12 | 98.8 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 18 | 98.7 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 20 | 98.6 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 3 | 98.4 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 14 | 98.4 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 17 | 98.3 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 6 | 98.1 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 6 | 97.9 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 11 | 97.9 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 12 | 97.9 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 20 | 97.9 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 17 | 97.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 15 | 97.8 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 7 | 97.8 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 7 | 97.7 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 7 | 97.6 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 17 | 97.4 |
| (1,75) | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 1:A:46:VAL:CA | 1:A:46:VAL:C | 10 | 97.4 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 3 | 97.4 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 11 | 97.3 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 9 | 97.3 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 4 | 97.3 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 12 | 97.2 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 10 | 97.2 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 9 | 97.1 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 14 | 97.0 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 3 | 97.0 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 12 | 96.9 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 14 | 96.9 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 4 | 96.9 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 9 | 96.8 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 19 | 96.8 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 10 | 96.7 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 5 | 96.6 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 6 | 96.5 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 12 | 96.5 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 8 | 96.4 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 15 | 96.4 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 20 | 96.4 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 3 | 96.3 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 8 | 96.3 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 11 | 96.1 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 10 | 96.0 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 14 | 96.0 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 18 | 96.0 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 16 | 95.9 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 8 | 95.8 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 5 | 95.8 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 7 | 95.6 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 1 | 95.6 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 4 | 95.6 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 19 | 95.5 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 12 | 95.5 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 5 | 95.4 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 8 | 95.2 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 16 | 95.2 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 15 | 95.2 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 18 | 95.2 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 16 | 95.2 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 18 | 95.1 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 19 | 95.1 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 18 | 95.1 |
| (1,93) | 1:A:57:LEU:C | 1:A:58:SER:N | 1:A:58:SER:CA | 1:A:58:SER:C | 2 | 95.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 7 | 95.0 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 6 | 95.0 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 13 | 94.9 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 19 | 94.9 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 9 | 94.9 |
| (1,68) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:LYS:N | 17 | 94.8 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 18 | 94.8 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 4 | 94.8 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 13 | 94.6 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 19 | 94.5 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 12 | 94.4 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 18 | 94.3 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 1 | 94.2 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 4 | 94.2 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 16 | 94.2 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 20 | 94.1 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 9 | 94.1 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 5 | 94.1 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 5 | 94.1 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 13 | 94.0 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 11 | 93.9 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 18 | 93.8 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 12 | 93.6 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 15 | 93.5 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 16 | 93.4 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 19 | 93.1 |
| (1,3) | 1:A:3:MET:C | 1:A:4:ASN:N | 1:A:4:ASN:CA | 1:A:4:ASN:C | 10 | 93.1 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 13 | 93.0 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 15 | 92.9 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 4 | 92.8 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 14 | 92.8 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 13 | 92.8 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 16 | 92.6 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 10 | 92.6 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 7 | 92.6 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 8 | 92.6 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 15 | 92.6 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 15 | 92.5 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 9 | 92.4 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 12 | 92.2 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 5 | 92.1 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 5 | 92.1 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 4 | 92.1 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 7 | 92.1 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 11 | 92.1 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 16 | 92.1 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 2 | 92.1 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 15 | 91.9 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 10 | 91.9 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 18 | 91.8 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 10 | 91.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|--------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 17 | 91.8 |
| (1,57) | 1:A:33:LYS:C | 1:A:34:VAL:N | 1:A:34:VAL:CA | 1:A:34:VAL:C | 2 | 91.7 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 13 | 91.7 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 16 | 91.7 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 19 | 91.7 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 9 | 91.7 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 13 | 91.6 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 8 | 91.6 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 1 | 91.5 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 3 | 91.5 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 11 | 91.5 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 16 | 91.4 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1 | 91.3 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 8 | 91.2 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 14 | 91.2 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 19 | 91.2 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 4 | 91.2 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 17 | 90.9 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 17 | 90.7 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 3 | 90.6 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 16 | 90.6 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 8 | 90.5 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 13 | 90.4 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 13 | 90.4 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 15 | 90.4 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 7 | 90.3 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 12 | 90.2 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 6 | 90.2 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 5 | 90.2 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 8 | 90.1 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 13 | 90.1 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 15 | 90.0 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 4 | 89.8 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 19 | 89.7 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 8 | 89.7 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 12 | 89.6 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 7 | 89.6 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 2 | 89.6 |
| (1,39) | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 20 | 89.6 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 3 | 89.5 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 8 | 89.3 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 6 | 88.5 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 3 | 88.4 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 2 | 88.4 |
| (1,21) | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 20 | 88.4 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 12 | 88.2 |
| (1,43) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 1:A:26:ASN:CA | 1:A:26:ASN:C | 10 | 88.2 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 15 | 88.1 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 20 | 87.9 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 20 | 87.8 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1 | 87.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 10 | 87.6 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 20 | 87.6 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 8 | 87.6 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 7 | 87.5 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 4 | 87.4 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 2 | 87.4 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 5 | 87.4 |
| (1,33) | 1:A:19:ILE:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1 | 87.4 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 3 | 87.4 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 17 | 87.4 |
| (1,42) | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:ASN:N | 2 | 87.3 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 13 | 87.1 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1 | 87.1 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 5 | 86.8 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 7 | 86.7 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 10 | 86.7 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 16 | 86.6 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 2 | 86.5 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 4 | 86.5 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 2 | 86.4 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 10 | 86.2 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 9 | 86.0 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 4 | 86.0 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 3 | 85.9 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 1 | 85.8 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 3 | 85.7 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1 | 85.5 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 11 | 85.3 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 2 | 85.3 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 11 | 85.1 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 4 | 84.9 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 14 | 84.8 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 11 | 84.5 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 19 | 84.4 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 10 | 84.2 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 13 | 84.1 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 3 | 83.9 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 9 | 83.9 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 8 | 83.9 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1 | 83.7 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 14 | 83.7 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 14 | 83.7 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 8 | 83.7 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 1 | 83.6 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 12 | 83.6 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 16 | 83.5 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 15 | 83.4 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 20 | 83.3 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 13 | 83.3 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 7 | 83.1 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 15 | 83.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 4 | 83.0 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 18 | 83.0 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 3 | 82.9 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 18 | 82.9 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 2 | 82.9 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 17 | 82.9 |
| (1,103) | 1:A:63:LYS:C | 1:A:64:VAL:N | 1:A:64:VAL:CA | 1:A:64:VAL:C | 19 | 82.9 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 18 | 82.7 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 9 | 82.7 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 4 | 82.7 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 5 | 82.7 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 19 | 82.6 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1 | 82.5 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 19 | 82.4 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 4 | 82.3 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1 | 82.3 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 18 | 82.1 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 9 | 82.1 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 11 | 82.1 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 20 | 82.0 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 12 | 81.9 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 5 | 81.9 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 6 | 81.9 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 7 | 81.6 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 20 | 81.6 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 5 | 81.6 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 6 | 81.6 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 10 | 81.5 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 16 | 81.5 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 15 | 81.4 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 17 | 81.4 |
| (1,13) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:TRP:N | 1:A:10:TRP:CA | 1:A:10:TRP:C | 5 | 81.4 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 14 | 81.3 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 4 | 81.1 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 17 | 81.1 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 5 | 80.8 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 18 | 80.8 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 13 | 80.7 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 6 | 80.6 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 8 | 80.6 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 15 | 80.4 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 13 | 80.3 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 10 | 80.2 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 17 | 80.2 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 3 | 80.2 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 6 | 80.1 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 12 | 79.9 |
| (1,47) | 1:A:27:ARG:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 20 | 79.8 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 19 | 79.7 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 2 | 79.5 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 8 | 79.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 16 | 79.4 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 6 | 79.3 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 2 | 79.2 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 2 | 79.1 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 4 | 79.1 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 6 | 79.0 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 5 | 78.9 |
| (1,74) | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 1:A:46:VAL:N | 19 | 78.8 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 20 | 78.8 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 16 | 78.7 |
| (1,37) | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 19 | 78.5 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 1 | 78.4 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 10 | 78.4 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 12 | 78.2 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 9 | 78.1 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 5 | 78.0 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 17 | 78.0 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 15 | 78.0 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 20 | 78.0 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 16 | 77.9 |
| (1,65) | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 18 | 77.8 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 14 | 77.7 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 12 | 77.7 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 2 | 77.5 |
| (1,15) | 1:A:10:TRP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 20 | 77.5 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 12 | 77.4 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 2 | 77.4 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 2 | 77.3 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 5 | 77.3 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 11 | 77.2 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 14 | 77.2 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 18 | 77.1 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 13 | 77.1 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 17 | 76.9 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 13 | 76.9 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 6 | 76.8 |
| (1,89) | 1:A:54:ASN:C | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 7 | 76.7 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 11 | 76.7 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 11 | 76.7 |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 4 | 76.7 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 16 | 76.6 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 17 | 76.5 |
| (1,67) | 1:A:40:ILE:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 18 | 76.5 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 11 | 76.4 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 18 | 76.4 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 10 | 76.4 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 9 | 76.4 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 11 | 76.3 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 15 | 76.2 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 3 | 76.2 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 5 | 76.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 20 | 76.2 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 20 | 76.1 |
| (1,88) | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1:A:54:ASN:N | 7 | 75.9 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 4 | 75.8 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 9 | 75.4 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 11 | 75.3 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 8 | 75.2 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 9 | 75.2 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 17 | 75.2 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 14 | 75.2 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 9 | 75.1 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 9 | 75.0 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 3 | 75.0 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 13 | 75.0 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 19 | 75.0 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 9 | 74.9 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 15 | 74.9 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 10 | 74.7 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 9 | 74.7 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 8 | 74.6 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 14 | 74.4 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 14 | 74.4 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 14 | 74.2 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 16 | 74.1 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 4 | 74.1 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 4 | 74.0 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 4 | 73.9 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 8 | 73.9 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 12 | 73.9 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 14 | 73.8 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 18 | 73.8 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 13 | 73.7 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 5 | 73.6 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1 | 73.6 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 15 | 73.6 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 16 | 73.6 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 15 | 73.6 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 5 | 73.5 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 19 | 73.5 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 6 | 73.4 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 13 | 73.4 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 1 | 73.4 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 8 | 73.3 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 17 | 73.2 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 5 | 73.1 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 20 | 73.0 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 11 | 72.9 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 8 | 72.9 |
| (1,9) | 1:A:6:THR:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 19 | 72.8 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 19 | 72.7 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 7 | 72.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 18 | 72.4 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 1 | 72.3 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 7 | 72.3 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 10 | 72.3 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 10 | 72.3 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 12 | 72.2 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 20 | 72.1 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 3 | 72.1 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 4 | 72.0 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 12 | 72.0 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 12 | 71.9 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 15 | 71.6 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 7 | 71.6 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 18 | 71.5 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 18 | 71.5 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 17 | 71.5 |
| (1,62) | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1:A:37:PRO:N | 7 | 71.4 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 6 | 71.4 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 17 | 71.0 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 14 | 71.0 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 5 | 71.0 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 11 | 70.7 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 3 | 70.6 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 6 | 70.5 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 14 | 70.4 |
| (1,77) | 1:A:46:VAL:C | 1:A:47:THR:N | 1:A:47:THR:CA | 1:A:47:THR:C | 12 | 70.3 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 12 | 70.3 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 9 | 70.2 |
| (1,91) | 1:A:56:GLY:C | 1:A:57:LEU:N | 1:A:57:LEU:CA | 1:A:57:LEU:C | 20 | 70.1 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 13 | 69.9 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 8 | 69.8 |
| (1,99) | 1:A:61:ALA:C | 1:A:62:VAL:N | 1:A:62:VAL:CA | 1:A:62:VAL:C | 13 | 69.5 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 15 | 69.4 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 12 | 69.4 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 3 | 69.4 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 3 | 69.3 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 15 | 69.2 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 16 | 69.1 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 17 | 69.1 |
| (1,23) | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 2 | 68.9 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 14 | 68.8 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1 | 68.8 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 12 | 68.7 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 16 | 68.7 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 18 | 68.6 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 9 | 68.5 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 11 | 68.5 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 6 | 68.5 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 14 | 68.4 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 11 | 68.3 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 9 | 68.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 10 | 68.1 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 2 | 68.1 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1 | 68.0 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 2 | 67.9 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 19 | 67.8 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 20 | 67.8 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 7 | 67.7 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 20 | 67.6 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 15 | 67.4 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 17 | 67.4 |
| (1,41) | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1:A:25:ASP:CA | 1:A:25:ASP:C | 11 | 67.4 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 5 | 67.3 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 18 | 67.3 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1 | 67.2 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 13 | 67.1 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 17 | 67.0 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 3 | 66.9 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 8 | 66.5 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 2 | 66.4 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 1 | 66.4 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 6 | 66.4 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 17 | 66.4 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 16 | 66.2 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 19 | 66.1 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 10 | 65.8 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 20 | 65.6 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1 | 65.5 |
| (1,61) | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1:A:36:ASN:CA | 1:A:36:ASN:C | 2 | 65.5 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 19 | 65.5 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 19 | 65.3 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 2 | 65.2 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 13 | 64.9 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 10 | 64.7 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 7 | 64.3 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 20 | 64.2 |
| (1,19) | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 18 | 64.0 |
| (1,59) | 1:A:34:VAL:C | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 7 | 63.9 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 3 | 63.8 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 15 | 63.3 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 16 | 63.0 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 5 | 62.9 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 13 | 62.8 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 17 | 62.5 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 13 | 62.5 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 16 | 62.4 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 15 | 62.4 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 12 | 62.4 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 2 | 62.3 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 19 | 62.3 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 17 | 62.2 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 10 | 62.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 20 | 61.9 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 15 | 61.8 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 9 | 61.7 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 8 | 61.6 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 4 | 61.6 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 14 | 61.5 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1 | 61.3 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 16 | 61.3 |
| (1,55) | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 3 | 61.2 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 11 | 61.2 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 8 | 61.1 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 14 | 61.1 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 9 | 61.0 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 2 | 61.0 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 11 | 61.0 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 6 | 60.9 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 10 | 60.8 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 18 | 60.7 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 8 | 60.3 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 18 | 60.2 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 4 | 59.9 |
| (1,105) | 1:A:64:VAL:C | 1:A:65:VAL:N | 1:A:65:VAL:CA | 1:A:65:VAL:C | 6 | 59.9 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 7 | 59.7 |
| (1,17) | 1:A:11:PHE:C | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 7 | 59.6 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 10 | 59.4 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 3 | 59.4 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 16 | 59.3 |
| (1,73) | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1:A:45:ALA:CA | 1:A:45:ALA:C | 13 | 59.1 |
| (1,63) | 1:A:37:PRO:C | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 5 | 59.0 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 3 | 58.9 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1 | 58.7 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 5 | 58.7 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 11 | 58.5 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 15 | 58.5 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 8 | 58.5 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 13 | 58.4 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 7 | 57.9 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 9 | 57.9 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 4 | 57.9 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 2 | 57.8 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 14 | 57.8 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 12 | 57.1 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 6 | 56.6 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 3 | 56.1 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 12 | 56.0 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 19 | 55.9 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 4 | 55.5 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 20 | 55.5 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 19 | 54.9 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 6 | 54.7 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 17 | 53.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 7 | 53.3 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 9 | 52.9 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 10 | 52.9 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 17 | 52.6 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 11 | 52.3 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 18 | 51.8 |
| (1,71) | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 6 | 51.4 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 14 | 51.3 |
| (1,81) | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:GLU:N | 1:A:49:GLU:CA | 1:A:49:GLU:C | 18 | 51.0 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 7 | 50.9 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 5 | 49.9 |
| (1,53) | 1:A:30:HIS:C | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 17 | 49.8 |
| (1,69) | 1:A:42:LYS:C | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 6 | 49.4 |
| (1,35) | 1:A:21:ASP:C | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1 | 49.2 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 16 | 49.2 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 8 | 47.9 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 4 | 47.0 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 13 | 47.0 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 15 | 46.6 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 12 | 45.9 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 8 | 45.8 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 13 | 45.1 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 16 | 44.3 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 12 | 43.0 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 9 | 41.9 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 10 | 41.9 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 18 | 41.6 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 6 | 41.2 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 17 | 41.2 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 7 | 41.1 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 11 | 41.1 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 16 | 41.0 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 19 | 41.0 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 15 | 40.9 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 14 | 40.1 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 5 | 39.5 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 14 | 39.5 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 20 | 39.3 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 17 | 39.2 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 9 | 39.2 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 2 | 39.1 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 11 | 38.9 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 7 | 38.5 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 10 | 38.2 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 2 | 38.0 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 1 | 37.9 |
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 1 | 37.8 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 3 | 37.8 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 6 | 37.5 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 18 | 37.2 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 3 | 37.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,87) | 1:A:52:THR:C | 1:A:53:ASN:N | 1:A:53:ASN:CA | 1:A:53:ASN:C | 3 | 35.6 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 18 | 35.5 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 7 | 35.3 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 6 | 35.0 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 12 | 35.0 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 17 | 34.6 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 9 | 34.3 |
| (1,60) | 1:A:35:ALA:N | 1:A:35:ALA:CA | 1:A:35:ALA:C | 1:A:36:ASN:N | 19 | 34.0 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 11 | 33.9 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 1 | 33.4 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 19 | 32.5 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 20 | 32.5 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 8 | 32.4 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 18 | 32.1 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 14 | 32.0 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 2 | 31.5 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 4 | 31.2 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 12 | 31.2 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 15 | 30.8 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 19 | 30.6 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 6 | 30.6 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 13 | 30.6 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 17 | 30.2 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 2 | 30.1 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 15 | 30.1 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 17 | 30.1 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 3 | 30.1 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 13 | 29.9 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 19 | 29.8 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 12 | 29.6 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 9 | 29.6 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 3 | 29.6 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 15 | 29.4 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 1 | 29.1 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 2 | 28.9 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 5 | 28.8 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 5 | 28.5 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 16 | 28.4 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 11 | 28.4 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 1 | 28.3 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 14 | 28.2 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 13 | 28.1 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 8 | 28.1 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 18 | 28.0 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 16 | 27.9 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 20 | 27.9 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 2 | 27.9 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 1 | 27.8 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 13 | 27.8 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 8 | 27.8 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 8 | 27.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 4 | 27.5 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 16 | 27.4 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 15 | 27.3 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 17 | 27.3 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 9 | 27.2 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 14 | 27.1 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 11 | 26.9 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 3 | 26.6 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 11 | 26.6 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 4 | 26.4 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 5 | 26.1 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 7 | 25.8 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 6 | 25.5 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 10 | 25.3 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 6 | 25.2 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 18 | 25.2 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 9 | 24.9 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 1 | 24.9 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 13 | 24.7 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 7 | 24.7 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 8 | 24.4 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 19 | 24.3 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 2 | 24.3 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 1 | 24.2 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 2 | 24.2 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 10 | 24.1 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 4 | 24.1 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 10 | 23.9 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 6 | 23.5 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 15 | 23.5 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 7 | 23.4 |
| (1,18) | 1:A:12:LYS:N | 1:A:12:LYS:CA | 1:A:12:LYS:C | 1:A:13:ASP:N | 3 | 23.4 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 14 | 23.3 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 15 | 23.1 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 10 | 23.1 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 8 | 23.0 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 7 | 22.8 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 12 | 22.7 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 12 | 22.7 |
| (1,20) | 1:A:13:ASP:N | 1:A:13:ASP:CA | 1:A:13:ASP:C | 1:A:14:LYS:N | 19 | 22.7 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 16 | 22.6 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 13 | 22.6 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 20 | 22.5 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 17 | 22.4 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 10 | 22.4 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 20 | 22.4 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 7 | 22.3 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 14 | 22.3 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 9 | 22.2 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 11 | 22.1 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 12 | 22.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 18 | 21.9 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 9 | 21.7 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 11 | 21.7 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 14 | 21.7 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 12 | 21.5 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 9 | 21.5 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 3 | 21.3 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 1 | 21.3 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 12 | 21.3 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 8 | 21.2 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 16 | 20.9 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 19 | 20.9 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 11 | 20.6 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 14 | 20.6 |
| (1,54) | 1:A:31:VAL:N | 1:A:31:VAL:CA | 1:A:31:VAL:C | 1:A:32:ILE:N | 10 | 20.3 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 7 | 19.7 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 5 | 19.5 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 20 | 19.5 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 16 | 19.4 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 8 | 19.3 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 15 | 18.9 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 4 | 18.6 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 7 | 18.2 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 17 | 18.1 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 6 | 17.9 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 5 | 17.7 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 19 | 17.7 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 14 | 17.5 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 20 | 17.5 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 11 | 17.4 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 14 | 17.4 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 9 | 17.3 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 16 | 17.2 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 15 | 17.1 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 5 | 16.9 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 6 | 16.6 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 3 | 16.5 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 12 | 16.2 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 16 | 16.2 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 10 | 15.5 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 7 | 15.5 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 9 | 15.3 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 19 | 15.3 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 8 | 15.2 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 13 | 14.8 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 13 | 14.7 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 10 | 14.7 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 11 | 14.6 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 4 | 14.6 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 5 | 14.6 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 15 | 14.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 10 | 14.2 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 5 | 14.0 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 8 | 13.9 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 5 | 13.9 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 4 | 13.9 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 4 | 13.6 |
| (1,24) | 1:A:15:GLY:N | 1:A:15:GLY:CA | 1:A:15:GLY:C | 1:A:16:PHE:N | 17 | 13.4 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 3 | 13.4 |
| (1,56) | 1:A:32:ILE:N | 1:A:32:ILE:CA | 1:A:32:ILE:C | 1:A:33:LYS:N | 4 | 13.3 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 5 | 13.2 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 13 | 13.1 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 4 | 12.9 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 6 | 12.9 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 12 | 12.8 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 2 | 12.8 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 18 | 12.8 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 10 | 12.6 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 15 | 12.5 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 16 | 12.5 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 2 | 12.3 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 12 | 11.9 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 9 | 11.9 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 6 | 11.7 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 13 | 11.6 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 13 | 11.0 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 7 | 10.9 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 8 | 10.7 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 18 | 10.6 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 14 | 10.5 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 9 | 10.4 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 15 | 10.3 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 11 | 10.2 |
| (1,22) | 1:A:14:LYS:N | 1:A:14:LYS:CA | 1:A:14:LYS:C | 1:A:15:GLY:N | 1 | 10.0 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 14 | 9.8 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 20 | 9.8 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 13 | 9.6 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 17 | 9.5 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 15 | 9.4 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 6 | 9.1 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 17 | 9.1 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 20 | 9.1 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 20 | 8.3 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 12 | 8.0 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 18 | 7.8 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 11 | 7.6 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 3 | 7.5 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 2 | 7.0 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 16 | 6.9 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 17 | 6.8 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 20 | 6.8 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 19 | 6.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 20 | 6.7 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 6 | 6.7 |
| (1,36) | 1:A:22:GLU:N | 1:A:22:GLU:CA | 1:A:22:GLU:C | 1:A:23:ASN:N | 18 | 6.6 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 5 | 6.5 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 20 | 6.4 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 15 | 6.1 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 10 | 6.0 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 16 | 5.9 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 17 | 5.7 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 9 | 5.7 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 13 | 5.6 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 11 | 5.4 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 2 | 5.2 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 9 | 5.2 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 19 | 4.9 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 14 | 4.9 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 1 | 4.8 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 18 | 4.6 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 2 | 4.4 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 8 | 4.4 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 1 | 4.4 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 2 | 4.3 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 20 | 4.3 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 12 | 4.3 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 16 | 4.3 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 4 | 4.2 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 8 | 4.2 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 1 | 4.2 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 19 | 4.1 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 1 | 4.1 |
| (1,90) | 1:A:55:LYS:N | 1:A:55:LYS:CA | 1:A:55:LYS:C | 1:A:56:GLY:N | 5 | 3.8 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 19 | 3.8 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 10 | 3.8 |
| (1,64) | 1:A:38:ASP:N | 1:A:38:ASP:CA | 1:A:38:ASP:C | 1:A:39:LEU:N | 2 | 3.7 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 3 | 3.5 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 18 | 3.5 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 1 | 3.2 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 17 | 3.2 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 5 | 2.9 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 3 | 2.5 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 3 | 2.1 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 17 | 2.1 |
| (1,72) | 1:A:44:ALA:N | 1:A:44:ALA:CA | 1:A:44:ALA:C | 1:A:45:ALA:N | 4 | 1.9 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 3 | 1.9 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 4 | 1.8 |
| (1,38) | 1:A:23:ASN:N | 1:A:23:ASN:CA | 1:A:23:ASN:C | 1:A:24:GLY:N | 3 | 1.8 |
| (1,66) | 1:A:39:LEU:N | 1:A:39:LEU:CA | 1:A:39:LEU:C | 1:A:40:ILE:N | 7 | 1.6 |
| (1,70) | 1:A:43:ASP:N | 1:A:43:ASP:CA | 1:A:43:ASP:C | 1:A:44:ALA:N | 7 | 1.3 |
| (1,40) | 1:A:24:GLY:N | 1:A:24:GLY:CA | 1:A:24:GLY:C | 1:A:25:ASP:N | 11 | 1.1 |