



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 07:59 PM EDT

PDB ID : 2N4F
BMRB ID : 16029
Title : EC-NMR Structure of Arabidopsis thaliana At2g32350 Determined by Combining Evolutionary Couplings (EC) and Sparse NMR Data. Northeast Structural Genomics Consortium target AR3433A
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

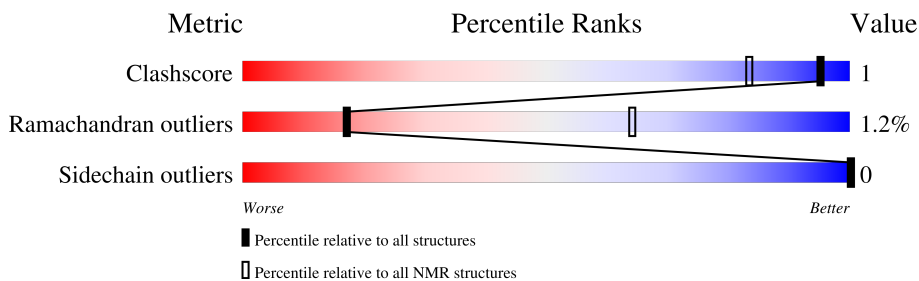
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 91%.

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	94	 74% 13% 11%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 7 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:75 (72)	0.46	7

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 6 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1388 atoms, of which 700 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called uncharacterized protein AR3433A.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	84	1388	439	700	117	131	1	0

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

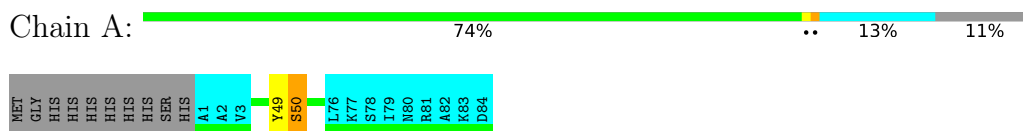
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-9	MET	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-8	GLY	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-7	HIS	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-6	HIS	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-5	HIS	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-4	HIS	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-3	HIS	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-2	HIS	-	expression tag	UNP Q9ZV63
A	-1	SER	-	expression tag	UNP Q9ZV63

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

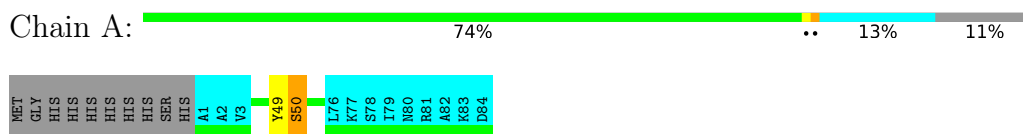


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

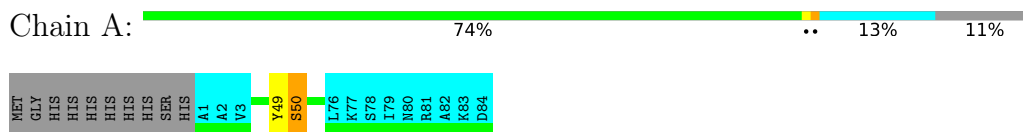
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A



4.2.3 Score per residue for model 3


- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

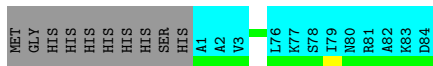
Chain A:  74% 13% 11%



4.2.4 Score per residue for model 4


- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

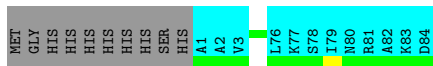
Chain A:  77% 13% 11%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  77% 13% 11%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  74% 13% 11%



4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

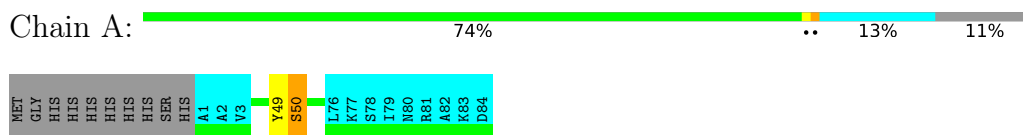
- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  74% 13% 11%



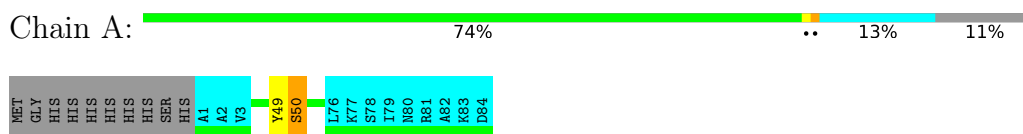
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A



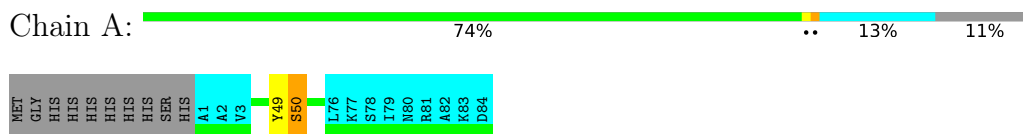
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A



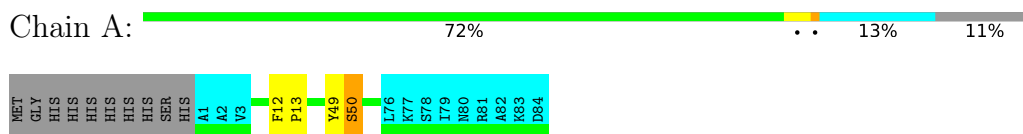
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A



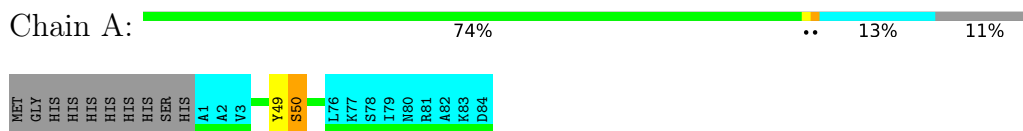
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

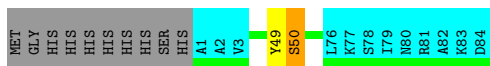
Chain A:  73% .. 13% 11%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  74% .. 13% 11%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  74% .. 13% 11%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  74% .. 13% 11%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  74% . 13% 11%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

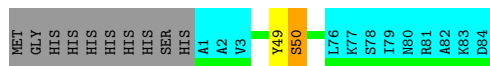
Chain A:  73% .. 13% 11%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

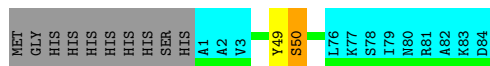
Chain A:  74% .. 13% 11%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: uncharacterized protein AR3433A

Chain A:  74% .. 13% 11%



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	1099
Number of shifts mapped to atoms	1099
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	91%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	598	600	602	1±1
All	All	11960	12000	12040	23

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 1.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LEU:O	1:A:30:LEU:HD23	0.60	1.97	13	1
1:A:49:TYR:O	1:A:50:SER:C	0.58	2.41	15	17
1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CD1	0.52	2.77	17	1
1:A:35:HIS:O	1:A:35:HIS:CD2	0.51	2.63	18	1
1:A:35:HIS:O	1:A:35:HIS:HD2	0.48	1.91	18	1
1:A:12:PHE:HB3	1:A:13:PRO:HD2	0.44	1.88	17	2

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	72/94 (77%)	70±1 (97±1%)	1±0 (2±1%)	1±0 (1±0%)	17	64
All	All	1440/1880 (77%)	1399 (97%)	24 (2%)	17 (1%)	17	64

All 1 unique Ramachandran outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	50	SER	17

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	69/87 (79%)	69±0 (100±0%)	0±0 (0±0%)	100	100
All	All	1380/1740 (79%)	1380 (100%)	0 (0%)	100	100

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

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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 91% for the well-defined parts and 91% 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	1099
Number of shifts mapped to atoms	1099
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing i

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	84	0.12 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	82	0.20 ± 0.15	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	83	0.05 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	80	0.39 ± 0.49	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 91%, i.e. 953 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1042. 0 out of 12 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	357/358 (100%)	144/144 (100%)	144/144 (100%)	69/70 (99%)
Sidechain	536/592 (91%)	364/383 (95%)	166/186 (89%)	6/23 (26%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	60/92 (65%)	35/44 (80%)	21/44 (48%)	4/4 (100%)
Overall	953/1042 (91%)	543/571 (95%)	331/374 (89%)	79/97 (81%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 91%, i.e. 1099 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1208. 0 out of 14 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	413/418 (99%)	166/168 (99%)	167/168 (99%)	80/82 (98%)
Sidechain	626/698 (90%)	426/452 (94%)	193/217 (89%)	7/29 (24%)
Aromatic	60/92 (65%)	35/44 (80%)	21/44 (48%)	4/4 (100%)
Overall	1099/1208 (91%)	627/664 (94%)	381/429 (89%)	91/115 (79%)

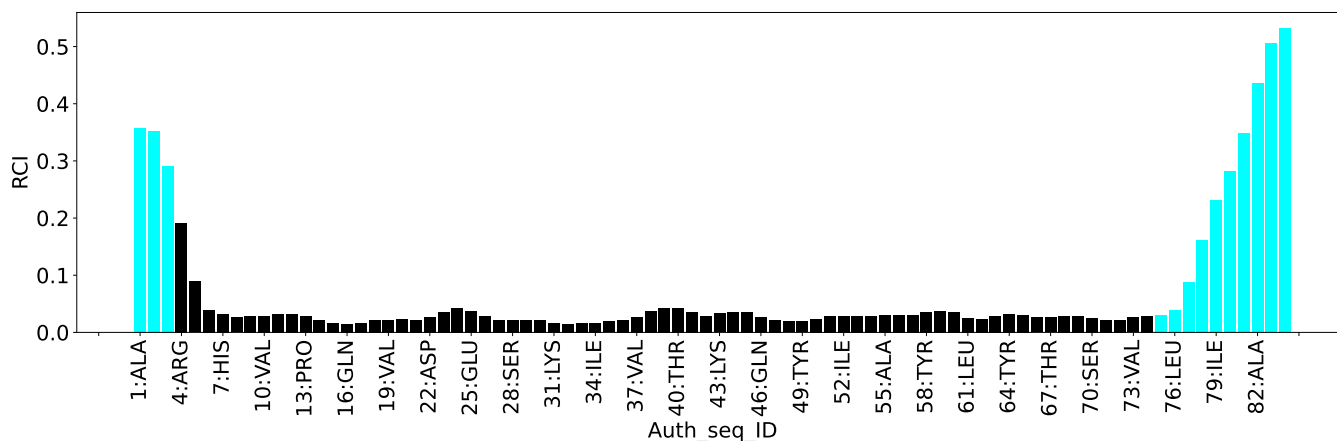
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis [i](#)

8.1 Conformationally restricting restraints [i](#)

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

Description	Value
Total distance restraints	89
Intra-residue ($ i-j =0$)	1
Sequential ($ i-j =1$)	53
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	14
Long range ($ i-j \geq 5$)	21
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	134
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	2.4
Number of long range restraints per residue ¹	0.2

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

8.2 Residual restraint violations [i](#)

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

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

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

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	2.3	9.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
10.0-20.0 (Medium)	2.5	20.0
>20.0 (Large)	129.1	179.1

9 Distance violation analysis [i](#)

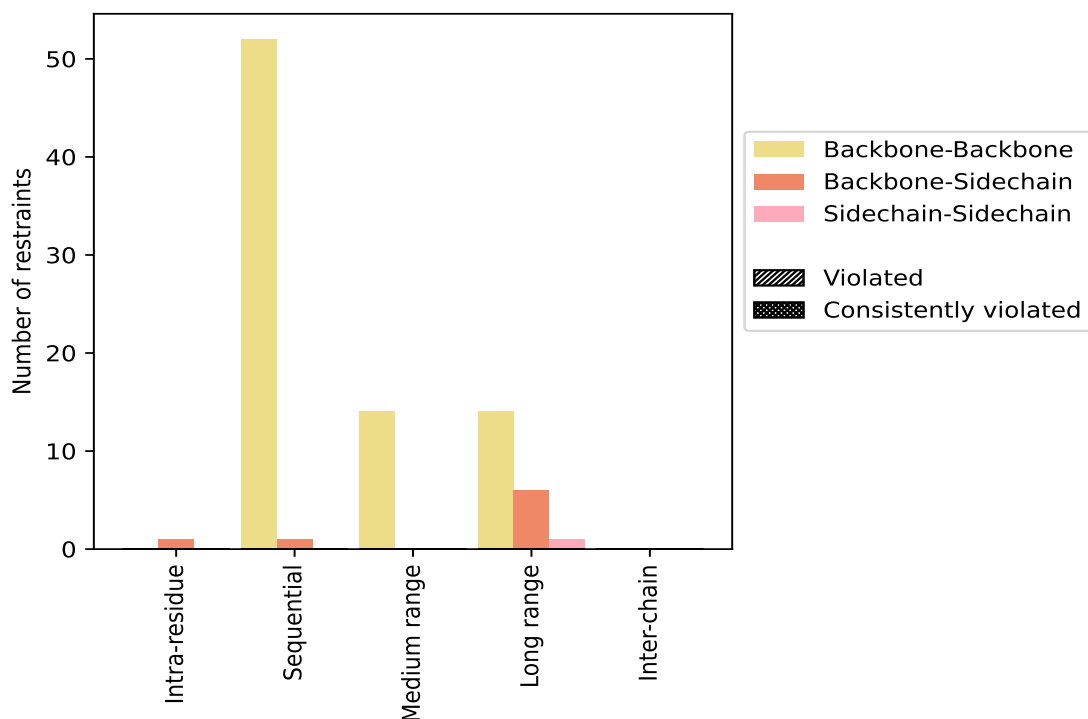
9.1 Summary of distance violations [i](#)

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	1	1.1	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	1	1.1	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 ($i-j =1$)	53	59.6	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	52	58.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1	1.1	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 ($i-j >1$ & $i-j <5$)	14	15.7	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	14	15.7	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 ($i-j \geq 5$)	21	23.6	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	14	15.7	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	6	6.7	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	1	1.1	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	89	100.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	80	89.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	8	9.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	1	1.1	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 disulfied bonds are counted in their appropriate category on the x-axis

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

No violations found

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

No violations found

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

No violations found

9.5 All violated distance restraints [i](#)

No violations found

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

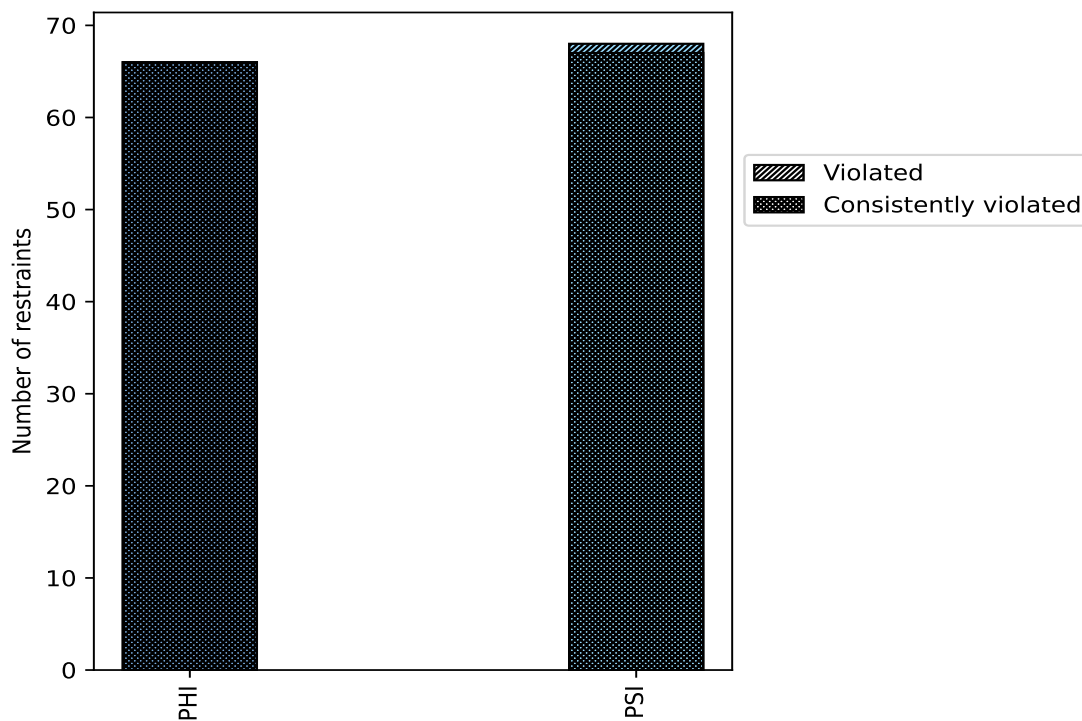
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	66	49.3	66	100.0	49.3	66	100.0	49.3
PSI	68	50.7	68	100.0	50.7	67	98.5	50.0
Total	134	100.0	134	100.0	100.0	133	99.3	99.3

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

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



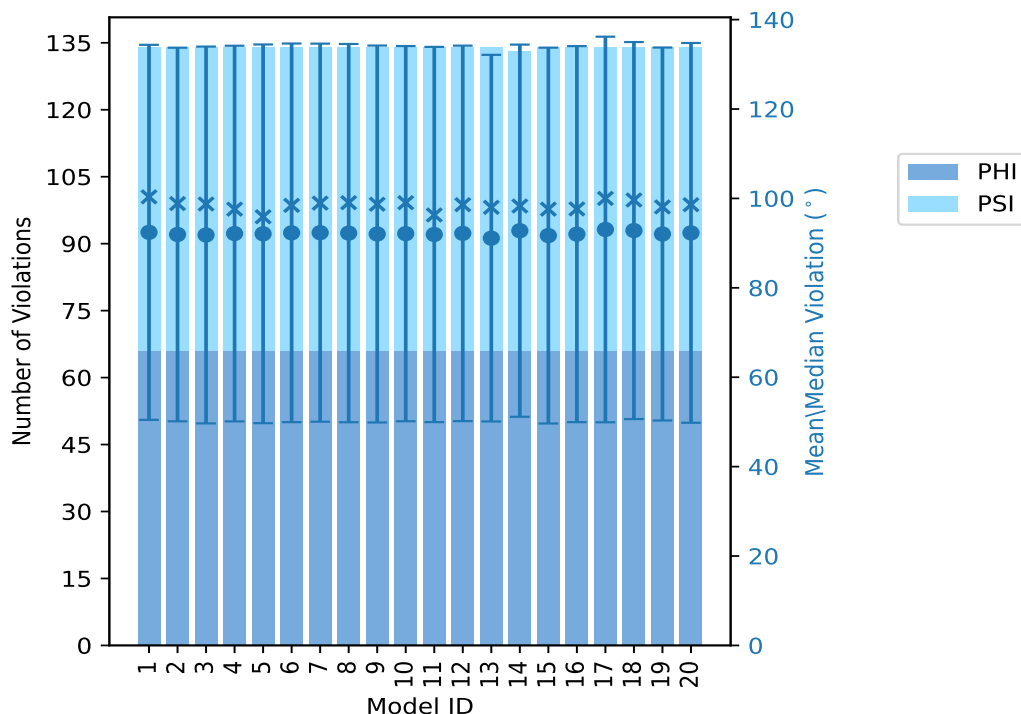
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	66	68	134	92.41	171.0	41.95	100.35
2	66	68	134	91.93	178.4	41.79	98.85
3	66	68	134	91.82	176.9	42.15	98.75
4	66	68	134	92.14	175.0	42.02	97.6
5	66	68	134	92.08	173.4	42.36	95.9
6	66	68	134	92.3	179.0	42.35	98.45
7	66	68	134	92.34	177.2	42.29	98.95
8	66	68	134	92.24	177.9	42.31	99.05
9	66	68	134	92.04	175.0	42.16	98.7
10	66	68	134	92.12	179.1	41.97	99.05
11	66	68	134	91.93	175.5	41.97	96.3
12	66	68	134	92.18	179.0	42.0	98.6
13	66	68	134	91.11	177.4	41.01	98.0
14	66	67	133	92.78	172.9	41.63	98.3
15	66	68	134	91.69	170.2	42.04	97.6
16	66	68	134	92.01	174.2	42.06	97.65
17	66	68	134	93.05	178.8	43.13	100.0
18	66	68	134	92.81	176.4	42.17	99.65
19	66	68	134	92.04	172.8	41.72	98.1
20	66	68	134	92.29	179.0	42.48	98.6

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



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

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

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

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

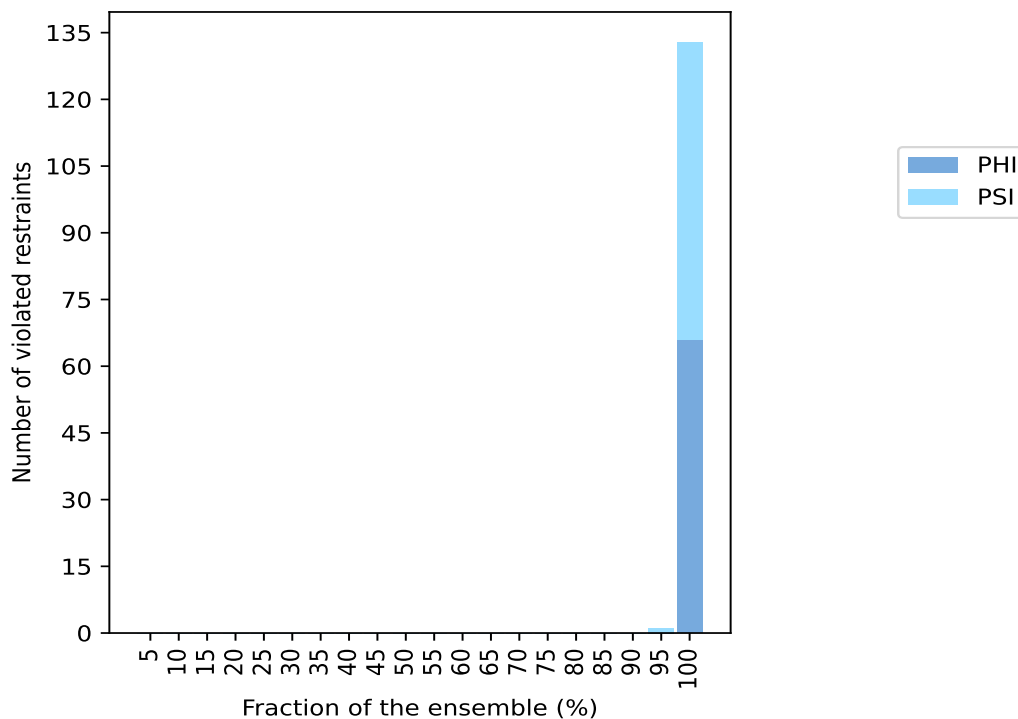
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
0	0	0	12	60.0
0	0	0	13	65.0
0	0	0	14	70.0
0	0	0	15	75.0
0	0	0	16	80.0
0	0	0	17	85.0
0	0	0	18	90.0
0	1	1	19	95.0
66	67	133	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

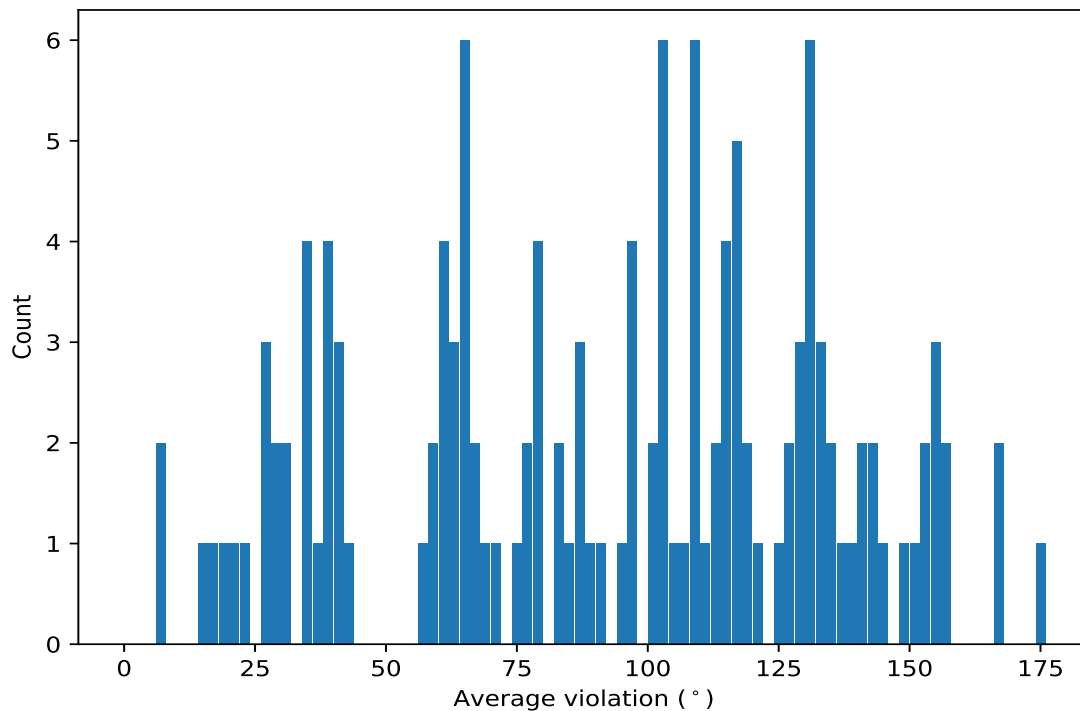


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	20	175.85	2.83	176.65
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	20	166.88	2.27	166.55
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	20	166.26	3.63	166.65
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	20	157.98	6.34	160.9
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	20	157.13	2.86	156.3
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	20	154.97	5.77	157.3
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	20	154.83	1.84	155.0
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	20	154.6	9.48	157.95
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	20	152.6	5.48	155.05
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	20	152.16	4.65	152.65
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	20	151.47	8.22	153.45
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	20	149.41	3.48	149.85
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	20	145.76	2.95	146.4
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	20	142.94	5.86	146.55
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	20	142.44	5.5	140.95
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	20	140.8	4.82	141.65
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	20	140.54	1.82	140.6
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	20	138.91	6.19	138.35
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	20	137.97	6.96	139.75
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	20	135.48	7.45	140.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	20	134.72	3.93	135.55
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	20	133.94	5.83	135.8
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	20	133.54	2.52	134.05
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	20	133.05	1.27	133.4
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	20	131.98	4.78	132.7
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	20	131.94	4.99	131.35
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	20	131.9	4.38	132.85
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	20	131.39	7.34	133.3
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	20	131.26	3.01	130.8
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	20	130.23	2.53	130.5
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	20	129.92	4.72	128.9
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	20	129.74	3.39	130.75
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	20	128.62	4.4	128.2
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	20	127.3	3.81	126.2
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	20	126.26	2.42	126.55
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	20	125.81	3.58	124.45
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	20	120.16	3.03	120.6
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	20	119.23	7.17	117.95
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	20	119.18	8.08	115.55
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	20	117.96	15.86	111.05
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	20	117.84	4.67	117.6
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	20	117.81	9.1	115.1
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	20	117.68	5.4	119.85
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	20	116.46	4.34	117.75
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	20	115.98	2.1	115.8
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	20	115.6	1.8	116.05
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	20	115.24	3.25	113.65
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	20	114.19	9.44	112.35
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	20	113.28	3.91	115.0
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	20	112.94	1.73	112.45
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	20	111.42	5.94	109.5
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	20	109.89	4.41	110.25
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	20	109.71	11.59	114.05
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	20	109.15	4.7	108.65
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	20	108.92	2.16	108.3
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	20	108.24	4.83	109.0
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	20	108.12	24.16	121.2
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	107.82	3.92	108.9
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	20	105.37	4.21	105.35
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	20	103.77	9.51	100.15
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	20	103.68	2.37	103.3
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	20	103.66	2.04	103.7
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	20	103.54	4.25	105.4
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	20	103.02	3.53	102.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	20	102.39	6.47	101.3
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	20	101.16	3.94	102.9
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	20	100.14	3.04	99.9
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	20	97.65	3.47	97.5
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	20	97.15	3.14	97.95
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	20	96.37	6.19	96.75
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	20	96.2	6.22	94.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	20	95.62	6.55	93.4
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	20	91.08	3.91	90.55
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	20	89.26	5.83	90.75
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	20	87.9	4.83	87.95
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	20	87.1	2.09	87.45
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	20	86.99	3.02	86.15
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	20	84.38	2.9	83.35
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	20	83.84	30.34	67.45
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	20	83.02	3.13	83.2
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	20	79.84	2.53	79.7
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	20	79.65	9.54	79.0
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	20	79.26	2.34	78.1
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	20	78.28	5.0	77.55
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	20	77.61	3.74	77.0
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	20	77.12	4.39	77.55
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	20	74.25	5.47	72.35
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	20	71.38	3.42	71.6
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	20	69.19	2.62	69.85
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	20	66.54	14.82	62.15
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	20	66.52	6.28	66.15
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	20	65.25	1.21	65.2
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	20	65.22	2.69	64.5
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	20	65.18	3.24	66.0
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	20	65.09	0.89	64.95
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	20	65.0	2.01	64.45
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	20	64.6	1.41	64.1
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	20	63.2	2.61	61.95
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	20	62.96	1.99	62.8
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	20	62.33	2.76	63.55
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	20	61.84	1.14	61.55
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	20	61.0	1.26	60.6
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	20	60.65	3.19	60.7
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	20	60.56	2.24	60.4
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	20	59.65	2.16	59.15
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	20	58.24	2.57	57.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	20	57.58	1.57	56.95
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	20	43.8	1.06	43.9
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	20	41.68	3.19	39.9
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	20	41.1	2.22	41.5
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	20	40.29	2.11	40.35
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	20	39.97	2.79	39.05
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	20	38.98	1.84	39.7
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	20	38.8	2.17	38.45
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	20	38.79	1.25	38.95
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	20	37.42	2.12	37.9
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	20	35.4	3.25	35.3
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	20	34.83	2.04	35.05
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	20	34.4	3.23	35.6
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	20	34.13	4.18	35.45
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	20	30.44	4.92	28.7
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	20	30.27	3.18	29.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

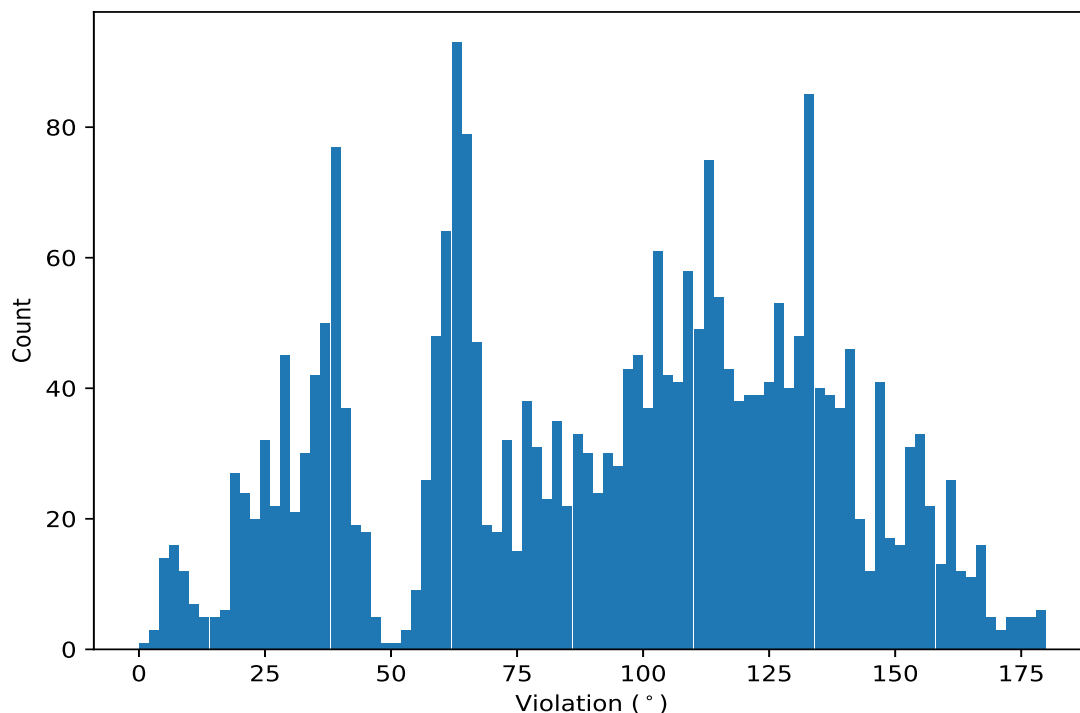
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	20	29.04	4.67	31.85
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	20	28.38	2.09	29.05
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	20	27.87	3.39	27.65
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	20	27.58	4.71	25.05
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	20	26.73	4.58	25.6
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	20	22.26	4.96	20.9
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	20	21.32	1.73	20.8
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	20	18.42	3.15	19.2
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	20	16.32	8.74	13.35
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	20	7.75	2.81	7.8
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	20	6.46	1.68	6.3
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	19	15.09	6.6	16.1

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 (°)
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	10	179.1
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	6	179.0
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	12	179.0
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	20	179.0
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	17	178.8
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	2	178.4
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	8	177.9
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	13	177.4
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	7	177.2
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	3	176.9
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	18	176.4
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	11	175.5
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	4	175.0
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	9	175.0
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	16	174.2
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	4	174.0
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	5	173.4
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	14	172.9
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	3	172.8
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	19	172.8
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	16	172.1
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	1	171.0
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	17	170.9
(1,118)	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1:A:68:GLU:N	15	170.2
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	4	169.5
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	14	169.3
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	8	169.0
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1	168.6
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	12	168.0
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	2	167.9
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	2	167.8
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	7	167.5
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	9	167.5
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	12	167.5
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	6	167.2
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	19	167.1
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	7	166.8
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	11	166.8
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	15	166.7
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	10	166.6
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	13	166.6
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	14	166.5
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	20	166.2
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	16	166.1
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	17	166.0
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	8	165.8
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	11	165.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	10	165.5
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	9	165.4
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	15	165.2
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	20	165.0
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	3	164.9
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	3	164.8
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	5	164.7
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	20	164.5
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	6	164.2
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	13	163.7
(1,33)	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	18	163.6
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	17	163.6
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	6	163.4
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	8	163.1
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	3	162.9
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	5	162.7
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	11	162.7
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	18	162.6
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	12	162.5
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	20	162.4
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	7	162.0
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	10	161.9
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	15	161.9
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	5	161.9
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1	161.8
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	18	161.8
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	19	161.8
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	8	161.8
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	14	161.8
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	9	161.8
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	19	161.8
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	8	161.7
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	17	161.7
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	9	161.6
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	16	161.5
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	16	161.3
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	14	161.3
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	15	161.2
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	6	161.1
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	5	160.7
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	18	160.5
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	12	160.5
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	13	160.5
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	17	160.3
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	3	160.1
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1	160.0
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	2	160.0
(1,43)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	17	159.9
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	5	159.8
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	10	159.6
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	14	159.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	15	159.4
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	7	159.4
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	12	159.4
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	11	159.2
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	2	158.9
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	16	158.8
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	14	158.3
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	19	158.1
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	11	158.1
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	16	157.8
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	10	157.7
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	19	157.7
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	4	157.4
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	18	157.2
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	13	157.2
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	5	157.1
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	6	157.1
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	7	157.0
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	4	156.9
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1	156.8
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	10	156.8
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	17	156.6
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	18	156.5
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	20	156.4
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1	156.3
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	12	156.2
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	9	156.2
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	8	156.1
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	9	156.0
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	14	156.0
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	5	156.0
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	20	155.8
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1	155.8
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	15	155.8
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	4	155.7
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	11	155.6
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	10	155.6
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	4	155.5
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	7	155.4
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	16	155.3
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	17	155.3
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	9	155.3
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	11	155.3
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	15	155.2
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	12	155.1
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	3	155.0
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	8	155.0
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	2	155.0
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	6	155.0
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	20	154.7
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	7	154.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	6	154.6
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	14	154.6
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	16	154.5
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	19	154.4
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	6	154.4
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	14	154.4
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	5	154.3
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	2	154.2
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	18	154.1
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	1	154.1
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	2	154.0
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	12	154.0
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	9	154.0
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	19	153.8
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	7	153.7
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	13	153.7
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	18	153.7
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	19	153.7
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	10	153.7
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	7	153.6
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	7	153.6
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	10	153.5
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	20	153.4
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	17	153.3
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	2	153.3
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	18	153.3
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	11	153.3
(1,16)	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1:A:13:PRO:N	5	153.2
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	5	153.1
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	12	153.1
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	3	153.0
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	19	153.0
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	5	153.0
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	19	152.9
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	4	152.8
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	17	152.8
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1	152.7
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	6	152.7
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	15	152.5
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	4	152.3
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	16	152.2
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	6	152.1
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	13	152.0
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	15	152.0
(1,41)	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	18	151.6
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	14	151.6
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	5	151.4
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	13	151.4
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	4	151.3
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	8	151.2
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	9	151.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	3	150.9
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	2	150.9
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	5	150.7
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	11	150.6
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	20	150.3
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	3	150.3
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	7	150.1
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	8	150.1
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	17	150.1
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	1	149.9
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	10	149.6
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	16	149.6
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	17	149.5
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1	149.4
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	10	149.2
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	16	149.1
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	14	148.9
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	16	148.9
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	2	148.7
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	8	148.7
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	17	148.7
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1	148.6
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	13	148.6
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	18	148.6
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	18	148.5
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	8	148.5
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	12	147.9
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	18	147.8
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	19	147.8
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	15	147.7
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	4	147.6
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1	147.5
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	2	147.5
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	19	147.5
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	7	147.3
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	14	147.3
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	8	147.3
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	6	147.1
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	10	147.1
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	20	147.1
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	5	147.0
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	9	147.0
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	19	147.0
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	11	146.9
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	6	146.9
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	14	146.9
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1	146.9
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	11	146.8
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	12	146.8
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	17	146.8
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	5	146.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	15	146.6
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	9	146.6
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	13	146.6
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	9	146.5
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	8	146.4
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	10	146.4
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	18	146.4
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	19	146.3
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	17	146.3
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	17	146.2
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	20	146.2
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	3	146.2
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	11	146.2
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	6	146.2
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	15	146.1
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	15	146.0
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	3	145.8
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	7	145.8
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	20	145.6
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	16	145.4
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	15	145.0
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	4	145.0
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1	144.9
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	18	144.7
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	17	144.6
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	11	144.6
(1,21)	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	3	144.3
(1,104)	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1	144.1
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	8	143.7
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	7	143.6
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	9	143.5
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	2	143.4
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	12	143.2
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	9	143.2
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	7	143.1
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	3	143.0
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	20	143.0
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	19	142.8
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	14	142.7
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	11	142.6
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	17	142.6
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	18	142.5
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1	142.4
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	19	142.2
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	19	142.2
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	13	142.2
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	6	142.1
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	8	142.1
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	20	141.9
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	6	141.8
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	12	141.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	10	141.7
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	11	141.7
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	3	141.5
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	2	141.5
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	20	141.4
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	12	141.4
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	16	141.3
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	11	141.3
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1	141.2
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	14	141.2
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	2	141.2
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	20	141.2
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	15	141.1
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1	141.0
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	12	141.0
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	3	141.0
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	14	141.0
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	9	140.9
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	4	140.9
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	9	140.9
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	20	140.9
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	7	140.9
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	10	140.9
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	11	140.9
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	9	140.8
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	9	140.8
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	2	140.7
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	18	140.7
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	11	140.6
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	2	140.6
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	4	140.6
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	10	140.6
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	20	140.6
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	18	140.6
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	5	140.5
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1	140.5
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	6	140.4
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	7	140.3
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	14	140.2
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	8	140.2
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	7	140.0
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	13	140.0
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	13	140.0
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	14	139.9
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	16	139.9
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	16	139.9
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	6	139.7
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	13	139.7
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	12	139.7
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	4	139.7
(1,25)	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	15	139.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	15	139.6
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	13	139.3
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	16	139.3
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	12	139.1
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	12	139.0
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	20	139.0
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	2	139.0
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	7	138.9
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	16	138.9
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	15	138.8
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	2	138.8
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	7	138.8
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	5	138.7
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	13	138.7
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	6	138.6
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	11	138.5
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	9	138.5
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	5	138.4
(1,23)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	18	138.4
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	10	138.4
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	13	138.4
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	10	138.2
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	8	138.2
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	6	138.2
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	8	138.1
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	6	138.0
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	20	138.0
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	4	138.0
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	14	138.0
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	10	137.9
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	15	137.9
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	17	137.9
(1,4)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	18	137.8
(1,29)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	19	137.7
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	3	137.5
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	8	137.4
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	13	137.4
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	3	137.4
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	5	137.3
(1,20)	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CA	1:A:15:LYS:C	3	137.2
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	4	137.0
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	19	137.0
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	19	136.9
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	9	136.9
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	4	136.8
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	6	136.8
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	6	136.7
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	4	136.7
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	13	136.7
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	14	136.6
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	11	136.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	16	136.6
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	7	136.6
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	19	136.5
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	18	136.5
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	20	136.5
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	4	136.4
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	16	136.4
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	17	136.4
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	16	136.3
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	9	136.3
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	3	136.2
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	13	136.2
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	9	136.1
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	15	136.1
(1,68)	1:A:41:PRO:N	1:A:41:PRO:CA	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	19	136.1
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	2	136.1
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	3	136.0
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	17	135.9
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	6	135.9
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	2	135.8
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	16	135.8
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	13	135.8
(1,24)	1:A:16:GLN:C	1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CA	1:A:17:PHE:C	12	135.8
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	7	135.8
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	8	135.8
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	20	135.6
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	17	135.4
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	8	134.9
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1	134.9
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	12	134.8
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	10	134.8
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	17	134.7
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	14	134.7
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	17	134.7
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	13	134.7
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	19	134.6
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	8	134.6
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	13	134.5
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	4	134.5
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	3	134.4
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	7	134.4
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	9	134.3
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	7	134.3
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	9	134.3
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	13	134.3
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	3	134.2
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	4	134.2
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	6	134.2
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	16	134.2
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	11	134.2
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	12	134.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	12	134.1
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	17	134.1
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	5	134.0
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	8	134.0
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	13	134.0
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	8	134.0
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	20	133.9
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	8	133.9
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	2	133.9
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	14	133.8
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	11	133.8
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	11	133.8
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1	133.8
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	18	133.8
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	4	133.8
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	9	133.8
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	7	133.7
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	3	133.7
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	16	133.7
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	12	133.7
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	20	133.7
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	10	133.7
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	17	133.7
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	19	133.6
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	15	133.6
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1	133.6
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	10	133.5
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	8	133.5
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	6	133.5
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	2	133.5
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	6	133.5
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	4	133.5
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	3	133.4
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	12	133.4
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	4	133.4
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	1	133.4
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	12	133.4
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	17	133.4
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	14	133.4
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	20	133.4
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	6	133.3
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	8	133.3
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	5	133.2
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	18	133.2
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	14	133.2
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	15	133.1
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	8	133.1
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	18	133.0
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	4	133.0
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	11	133.0
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	5	133.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	14	132.9
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	10	132.8
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	2	132.8
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	15	132.8
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	2	132.8
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	5	132.8
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1	132.7
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	11	132.7
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	11	132.6
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	13	132.6
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	3	132.6
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	6	132.6
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	8	132.6
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	17	132.5
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	7	132.5
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	18	132.5
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	16	132.5
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	20	132.5
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	13	132.4
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	10	132.4
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	20	132.4
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	12	132.4
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	7	132.4
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	16	132.3
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	14	132.3
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	19	132.3
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	9	132.3
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	3	132.2
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	16	132.2
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	7	132.2
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	18	132.2
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	7	132.2
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	8	132.1
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	13	132.1
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	9	132.0
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	4	132.0
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	6	132.0
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	10	132.0
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	15	132.0
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	3	132.0
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	14	131.9
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	5	131.8
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1	131.8
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	4	131.8
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	16	131.8
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	18	131.7
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	8	131.7
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	2	131.7
(1,2)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	10	131.7
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	20	131.7
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	10	131.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	10	131.6
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	6	131.5
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	12	131.5
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	15	131.5
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	3	131.4
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	10	131.4
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	5	131.4
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	2	131.3
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	17	131.3
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	2	131.3
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	6	131.2
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	5	131.2
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	5	131.2
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	4	131.1
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	3	130.8
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	4	130.8
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	20	130.8
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	11	130.8
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	20	130.7
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	9	130.7
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	19	130.7
(1,27)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	4	130.7
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	11	130.7
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	2	130.6
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	15	130.6
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1	130.5
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	9	130.5
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	14	130.4
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	13	130.3
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	11	130.2
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	2	130.2
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	4	130.2
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1	130.1
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	18	130.1
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	17	130.1
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	14	130.0
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	3	130.0
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	10	129.8
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	16	129.8
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	7	129.7
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	16	129.7
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	15	129.6
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	17	129.5
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	18	129.5
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	4	129.4
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	12	129.3
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	5	129.2
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1	129.2
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	19	129.1
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	16	129.0
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	20	129.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	4	128.9
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	14	128.9
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	14	128.8
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	2	128.8
(1,32)	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:C	18	128.8
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	17	128.8
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	18	128.8
(1,82)	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1	128.7
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	7	128.7
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	18	128.7
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	2	128.6
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	19	128.5
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	19	128.5
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	11	128.5
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	19	128.5
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	18	128.5
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	11	128.4
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	1	128.4
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	12	128.4
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	15	128.3
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	9	128.3
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	8	128.2
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	9	128.2
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	2	128.1
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	12	128.0
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	5	128.0
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	10	127.9
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	13	127.9
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1	127.8
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	3	127.7
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	14	127.7
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	10	127.6
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	17	127.6
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	11	127.6
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	10	127.6
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	3	127.5
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	16	127.5
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	17	127.5
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	4	127.5
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	13	127.5
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	18	127.4
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1	127.4
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	10	127.4
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	5	127.3
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	12	127.3
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	13	127.3
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	7	127.2
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	20	127.2
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	17	127.2
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	20	127.2
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	4	127.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	20	127.1
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	9	127.1
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	19	127.1
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	4	127.1
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	19	127.0
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	4	126.9
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	9	126.9
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	9	126.8
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	15	126.8
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	2	126.7
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	18	126.7
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	17	126.6
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	12	126.6
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	15	126.6
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	14	126.6
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	3	126.5
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	5	126.4
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	6	126.3
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	14	126.3
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	4	126.2
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	6	126.2
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	11	126.2
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	13	126.2
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	16	126.2
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	5	126.2
(1,76)	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	17	126.1
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	8	126.0
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	14	126.0
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	3	125.9
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	2	125.9
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	6	125.9
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	11	125.8
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	15	125.8
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	12	125.8
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1	125.8
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	7	125.7
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	17	125.7
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	4	125.7
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	7	125.7
(1,35)	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	5	125.7
(1,3)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	19	125.7
(1,128)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	15	125.7
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	3	125.6
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	5	125.5
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	12	125.3
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	2	125.2
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	6	125.1
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	12	125.1
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	19	125.1
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	4	125.0
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	20	124.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	4	124.9
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	2	124.9
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	11	124.8
(1,22)	1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	17	124.6
(1,130)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	19	124.6
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	9	124.6
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	5	124.5
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1	124.5
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1	124.4
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	2	124.4
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	5	124.4
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	13	124.4
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	8	124.3
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	5	124.3
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	16	124.2
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	11	124.1
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	15	124.0
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	18	124.0
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	18	123.9
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	16	123.9
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	10	123.8
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	18	123.8
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	7	123.8
(1,90)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	4	123.7
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	15	123.7
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	9	123.7
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	6	123.6
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	3	123.6
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	6	123.6
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	5	123.4
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	15	123.4
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	14	123.4
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	17	123.2
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	5	123.2
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	3	123.2
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	17	123.2
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	20	123.1
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	3	122.9
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	13	122.9
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	7	122.8
(1,132)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	19	122.8
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1	122.7
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	11	122.7
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	20	122.7
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	19	122.7
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	8	122.5
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	20	122.5
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	2	122.4
(1,126)	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	19	122.4
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	5	122.4
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	17	122.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	16	122.3
(1,124)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	15	122.3
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	15	122.2
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	8	122.1
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	11	122.1
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	8	122.0
(1,8)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	5	121.9
(1,67)	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1:A:41:PRO:N	5	121.9
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	8	121.8
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	7	121.8
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	7	121.7
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	9	121.7
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	7	121.7
(1,28)	1:A:18:THR:C	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	16	121.7
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	15	121.6
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	11	121.6
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	11	121.6
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	7	121.5
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	15	121.5
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	10	121.4
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	12	121.3
(1,6)	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	13	121.3
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	6	121.3
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	9	121.2
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	11	121.2
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	20	121.2
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	3	121.2
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	10	121.2
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	12	121.1
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1	121.1
(1,102)	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	12	121.0
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	20	120.9
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	7	120.8
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	3	120.6
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	16	120.6
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	13	120.6
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	17	120.6
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1	120.4
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	1	120.4
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1	120.4
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	20	120.4
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	15	120.3
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	12	120.3
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	7	120.1
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	11	120.0
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1	119.9
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	12	119.9
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	10	119.9
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	19	119.9
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	18	119.7
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	20	119.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	18	119.7
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	14	119.7
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	3	119.7
(1,78)	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	17	119.6
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	6	119.6
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	2	119.6
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	15	119.5
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	19	119.4
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	5	119.3
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	14	119.2
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	13	119.1
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	10	119.1
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	6	119.1
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1	119.1
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	10	119.0
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	14	119.0
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	13	119.0
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	20	118.9
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	4	118.9
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	20	118.8
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	17	118.8
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	8	118.6
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	19	118.5
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	11	118.4
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	6	118.4
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	18	118.4
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	14	118.4
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	9	118.2
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	12	118.1
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	12	118.0
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	7	118.0
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	7	118.0
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	5	117.9
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	9	117.9
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	2	117.9
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	2	117.8
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	11	117.8
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	15	117.7
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	15	117.7
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	14	117.6
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	9	117.6
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	5	117.5
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	13	117.5
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	18	117.5
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	16	117.4
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	12	117.3
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	6	117.3
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	10	117.3
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	9	117.0
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	10	117.0
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	6	116.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	13	116.9
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	2	116.9
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	16	116.9
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	8	116.9
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	16	116.9
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	12	116.9
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	1	116.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	19	116.7
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	6	116.7
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	2	116.6
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	20	116.6
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	17	116.5
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	18	116.5
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	5	116.4
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	3	116.3
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	3	116.3
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	12	116.2
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	2	116.2
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	16	116.2
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	6	116.1
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	12	116.1
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	16	116.1
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	11	116.0
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	14	116.0
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	2	115.9
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	9	115.8
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	19	115.8
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	9	115.8
(1,84)	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	15	115.7
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	12	115.7
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	8	115.7
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	9	115.7
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	8	115.7
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	20	115.6
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	4	115.6
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	17	115.5
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	6	115.4
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	13	115.3
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	14	115.3
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	17	115.3
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	8	115.3
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	17	115.3
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	5	115.3
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	11	115.2
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	15	115.2
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	13	115.1
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	12	115.1
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	7	115.0
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	10	115.0
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	6	115.0
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	4	115.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	14	115.0
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	4	115.0
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	6	114.9
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1	114.9
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	18	114.8
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	3	114.8
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	20	114.8
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	7	114.7
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	4	114.7
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	15	114.6
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	13	114.6
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1	114.5
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	13	114.4
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	19	114.4
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	19	114.4
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	18	114.3
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	11	114.3
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	7	114.3
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	19	114.3
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	7	114.2
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	2	114.1
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	10	114.1
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	14	114.1
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	2	114.0
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	15	114.0
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	18	114.0
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	10	114.0
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	16	113.9
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	5	113.9
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	18	113.9
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	7	113.9
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	3	113.8
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	12	113.7
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	16	113.7
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	10	113.7
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	20	113.7
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1	113.7
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	5	113.7
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	9	113.6
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	5	113.6
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	1	113.6
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	13	113.6
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	9	113.6
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	8	113.6
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	6	113.6
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	8	113.4
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	4	113.4
(1,31)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:VAL:N	19	113.4
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	18	113.4
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	5	113.4
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	6	113.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	15	113.3
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	10	113.3
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	14	113.3
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	4	113.3
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	8	113.1
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	14	113.1
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	16	113.1
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	18	113.0
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	20	113.0
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	3	113.0
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	9	113.0
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	14	112.9
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	7	112.9
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	20	112.9
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	16	112.9
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	20	112.8
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	19	112.8
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	12	112.8
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	3	112.7
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	7	112.6
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	8	112.6
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	13	112.6
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	3	112.5
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	18	112.4
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	13	112.4
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	8	112.4
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	14	112.4
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	12	112.3
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	10	112.3
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	13	112.3
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	10	112.2
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	11	112.2
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	3	112.2
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	14	112.2
(1,123)	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	15	112.2
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	10	112.2
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	9	112.2
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	18	112.2
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	6	112.1
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	8	112.1
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	9	112.1
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	13	112.1
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	18	112.1
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	16	112.1
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	19	112.1
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	20	112.1
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	17	112.1
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	2	112.0
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	6	112.0
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	11	112.0
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1	112.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	8	111.9
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	18	111.9
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	8	111.8
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	4	111.8
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	19	111.8
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	2	111.8
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	10	111.8
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	16	111.8
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	4	111.7
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	11	111.6
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	10	111.6
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	2	111.6
(1,10)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	15	111.6
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	7	111.5
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	15	111.4
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	9	111.4
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	2	111.3
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	11	111.3
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	15	111.2
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	1	111.2
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	19	111.1
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	5	111.1
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	10	111.0
(1,81)	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	1:A:48:TYR:CA	1:A:48:TYR:C	16	110.9
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	9	110.8
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	8	110.8
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	20	110.8
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	5	110.6
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	14	110.6
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	11	110.6
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1	110.5
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	8	110.5
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	9	110.5
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	16	110.5
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	9	110.5
(1,12)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	12	110.5
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	12	110.5
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	4	110.4
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	11	110.3
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	17	110.3
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	6	110.2
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	14	110.2
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	16	110.2
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	3	110.2
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	14	110.2
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	18	110.1
(1,14)	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	11	110.1
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	2	110.0
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	2	110.0
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	3	109.9
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	20	109.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	10	109.7
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	9	109.7
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	20	109.7
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	17	109.7
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	16	109.7
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	17	109.7
(1,92)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	18	109.5
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	16	109.5
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1	109.5
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	18	109.5
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	17	109.5
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	7	109.4
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	18	109.3
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1	109.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	17	109.2
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	2	109.2
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	12	109.1
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	109.1
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1	109.1
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	15	109.1
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	19	109.1
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	11	109.0
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	109.0
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	2	109.0
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	3	108.9
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	8	108.9
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	3	108.9
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	6	108.9
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	7	108.9
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	13	108.8
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	15	108.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	13	108.7
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	16	108.6
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	13	108.6
(1,122)	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:N	1	108.6
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	12	108.5
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	8	108.4
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	3	108.4
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	20	108.3
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	13	108.3
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	5	108.3
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	6	108.3
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	8	108.3
(1,116)	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	13	108.3
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	1	108.2
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	4	108.2
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	8	108.2
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	11	108.2
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	14	108.1
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	15	108.0
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	7	108.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	17	108.0
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	9	108.0
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	12	108.0
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	13	108.0
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	7	108.0
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	17	107.9
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	9	107.7
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	20	107.7
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	15	107.6
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	4	107.6
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	14	107.6
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	3	107.6
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	4	107.4
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	1	107.3
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	16	107.3
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	14	107.3
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	16	107.2
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	10	107.1
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	6	107.1
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	10	107.1
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	13	106.9
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	2	106.9
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	14	106.9
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	18	106.9
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	10	106.9
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	6	106.8
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	19	106.7
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	3	106.6
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	3	106.6
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	2	106.6
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	1	106.6
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	8	106.5
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	17	106.5
(1,79)	1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	4	106.4
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	19	106.3
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	7	106.3
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	10	106.3
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	9	106.2
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	3	106.1
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	8	106.1
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	17	106.1
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	11	106.1
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	13	106.0
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	1	106.0
(1,127)	1:A:73:VAL:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	15	106.0
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	3	106.0
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	3	105.9
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	5	105.9
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	13	105.8
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	14	105.8
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	15	105.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	19	105.7
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	15	105.7
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	5	105.7
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	12	105.7
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1	105.6
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	4	105.6
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	16	105.6
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	16	105.5
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	4	105.4
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	17	105.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	5	105.3
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	7	105.3
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	5	105.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	20	105.2
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	17	105.2
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	6	105.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	6	105.0
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	5	105.0
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	7	105.0
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	6	104.9
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	12	104.9
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	20	104.6
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	14	104.5
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	19	104.5
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	18	104.5
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	16	104.5
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	19	104.4
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	2	104.4
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	20	104.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	9	104.2
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	18	104.1
(1,7)	1:A:7:HIS:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	13	104.1
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	2	104.1
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	15	104.1
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	15	104.0
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	20	104.0
(1,119)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	18	104.0
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	2	103.8
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	8	103.8
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	10	103.8
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	12	103.8
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	13	103.7
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	14	103.7
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	6	103.6
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	9	103.6
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	10	103.6
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	14	103.6
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	16	103.6
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	11	103.6
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	17	103.5
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	8	103.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CA	1:A:47:LEU:C	1:A:48:TYR:N	19	103.4
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	19	103.4
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	3	103.3
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	9	103.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	7	103.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	8	103.3
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	9	103.3
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	13	103.2
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	18	103.1
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	6	103.1
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	19	103.0
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	3	103.0
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	7	103.0
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	20	102.9
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	17	102.9
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	12	102.8
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	14	102.8
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	10	102.8
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	14	102.8
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	17	102.7
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	18	102.7
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	5	102.6
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	17	102.6
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	2	102.6
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	19	102.6
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	16	102.5
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	7	102.5
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	2	102.5
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	12	102.5
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	13	102.5
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	16	102.5
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	8	102.5
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1	102.5
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	5	102.4
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	10	102.3
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	4	102.3
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1	102.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	1	102.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	2	102.3
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	6	102.3
(1,96)	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	4	102.2
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	14	102.2
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	1	102.2
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	8	102.2
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	3	102.0
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	19	102.0
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	12	102.0
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	3	101.9
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	12	101.9
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1	101.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	7	101.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	4	101.8
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	11	101.7
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	9	101.7
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	6	101.6
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	4	101.5
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1	101.4
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	9	101.3
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	10	101.3
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	7	101.2
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	13	101.2
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	10	101.1
(1,129)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	11	101.1
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	4	100.9
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	5	100.9
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	9	100.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	17	100.8
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	7	100.6
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	1	100.6
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	6	100.5
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	11	100.4
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	20	100.4
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	4	100.4
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	13	100.3
(1,26)	1:A:17:PHE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	19	100.3
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	10	100.2
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	14	100.2
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1	100.1
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	5	100.1
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	16	100.1
(1,121)	1:A:70:SER:C	1:A:71:GLU:N	1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:C	15	100.1
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	2	100.1
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	18	100.0
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	7	100.0
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	9	99.9
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	12	99.9
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	19	99.8
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	20	99.8
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	12	99.8
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	18	99.8
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	18	99.7
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	8	99.7
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	15	99.7
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	16	99.6
(1,83)	1:A:48:TYR:C	1:A:49:TYR:N	1:A:49:TYR:CA	1:A:49:TYR:C	18	99.6
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	4	99.6
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	15	99.5
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	2	99.4
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	3	99.4
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	12	99.4
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	13	99.4
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	3	99.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	20	99.4
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	17	99.2
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	8	99.1
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	11	99.1
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	8	99.0
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	2	99.0
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	13	98.9
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1	98.9
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	19	98.9
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	19	98.7
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	2	98.7
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	11	98.7
(1,77)	1:A:45:MET:C	1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CA	1:A:46:GLN:C	5	98.6
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	6	98.6
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	18	98.6
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	5	98.5
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	16	98.4
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	18	98.4
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	14	98.3
(1,66)	1:A:39:ASN:C	1:A:40:THR:N	1:A:40:THR:CA	1:A:40:THR:C	15	98.3
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	6	98.3
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	6	98.2
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	3	98.1
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1	98.0
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	8	98.0
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	11	98.0
(1,117)	1:A:66:ILE:C	1:A:67:THR:N	1:A:67:THR:CA	1:A:67:THR:C	11	98.0
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	7	97.9
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	10	97.9
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	6	97.8
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	12	97.8
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	4	97.8
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	20	97.8
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	15	97.7
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	20	97.6
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	19	97.5
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	15	97.5
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	7	97.5
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	9	97.5
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	12	97.5
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	4	97.4
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	20	97.4
(1,13)	1:A:10:VAL:C	1:A:11:LYS:N	1:A:11:LYS:CA	1:A:11:LYS:C	15	97.4
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	9	97.3
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	10	97.2
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	5	97.2
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	14	97.1
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	9	97.1
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	1	97.1
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	13	97.1
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	10	97.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	3	97.0
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	16	96.9
(1,86)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	15	96.9
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	3	96.9
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	12	96.8
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	7	96.8
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	12	96.8
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	19	96.8
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1	96.8
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	11	96.7
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	13	96.7
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	1	96.7
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1	96.6
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	2	96.4
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	6	96.4
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	8	96.3
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	13	96.3
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	8	96.2
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	17	96.1
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	6	95.9
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	19	95.9
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	11	95.9
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	15	95.8
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	14	95.7
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	2	95.6
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	16	95.6
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	2	95.4
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	10	95.3
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	6	95.2
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	3	95.1
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	18	95.1
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	14	94.9
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	17	94.9
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	4	94.6
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	16	94.6
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	8	94.6
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	5	94.6
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	13	94.5
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	13	94.4
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	13	94.4
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	5	94.3
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	8	94.3
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	18	94.2
(1,11)	1:A:9:THR:C	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	16	94.2
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	16	94.1
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	9	94.1
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	17	94.0
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	16	93.9
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	2	93.8
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	1	93.8
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	8	93.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	19	93.6
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	10	93.5
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	13	93.5
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	15	93.5
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	3	93.4
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	14	93.4
(1,30)	1:A:19:VAL:C	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	19	93.4
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	4	93.4
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	7	93.2
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	18	93.0
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	14	92.9
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	12	92.9
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	7	92.8
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	15	92.7
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	4	92.7
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	11	92.6
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	18	92.6
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	2	92.6
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	19	92.5
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	20	92.5
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	18	92.4
(1,125)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:VAL:N	1:A:73:VAL:CA	1:A:73:VAL:C	5	92.4
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	20	92.3
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1	92.2
(1,131)	1:A:75:PHE:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	11	92.2
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	11	92.0
(1,5)	1:A:6:ILE:C	1:A:7:HIS:N	1:A:7:HIS:CA	1:A:7:HIS:C	18	91.9
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	3	91.8
(1,15)	1:A:11:LYS:C	1:A:12:PHE:N	1:A:12:PHE:CA	1:A:12:PHE:C	11	91.7
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	3	91.6
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	17	91.6
(1,1)	1:A:4:ARG:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	17	91.6
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	8	91.4
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	5	91.4
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	9	91.3
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	6	91.2
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	5	91.0
(1,89)	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	4	90.9
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	16	90.9
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	15	90.8
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	9	90.8
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1	90.7
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	19	90.6
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	17	90.5
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	4	90.4
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	2	90.4
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	5	90.1
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	11	90.1
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	12	90.1
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	19	90.1
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	15	89.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	6	89.7
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	7	89.6
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	12	89.5
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	2	89.5
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1	89.5
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	4	89.4
(1,18)	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	5	89.3
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	18	89.2
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	7	89.2
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	16	89.2
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	18	89.2
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	18	89.1
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	14	89.1
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	16	89.0
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	13	88.9
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1	88.8
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	10	88.8
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	19	88.7
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	5	88.7
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	10	88.7
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	20	88.5
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	13	88.4
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	9	88.2
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	12	88.2
(1,34)	1:A:21:VAL:C	1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:CA	1:A:22:ASP:C	11	88.1
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	20	88.0
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	4	88.0
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	15	88.0
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	20	88.0
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	14	87.9
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	11	87.9
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1	87.9
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	3	87.8
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	20	87.8
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	11	87.7
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	14	87.7
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	5	87.6
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	4	87.6
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	15	87.5
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	17	87.4
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	9	87.4
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	9	87.4
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	8	87.4
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	12	87.3
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	12	87.3
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	2	87.2
(1,73)	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	17	87.2
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	7	87.1
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	4	87.0
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	2	86.9
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	3	86.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	14	86.7
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	15	86.7
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	11	86.6
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	2	86.6
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	20	86.5
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	10	86.4
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	10	86.3
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	19	86.3
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	18	86.3
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	11	86.2
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	6	86.1
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1	85.9
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	14	85.9
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	8	85.8
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	19	85.5
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	17	85.4
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	7	85.4
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	13	85.3
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	9	85.2
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	12	85.2
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	5	85.1
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	15	85.1
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	16	84.8
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	12	84.7
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	19	84.5
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	20	84.4
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	5	84.3
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	14	84.2
(1,87)	1:A:50:SER:C	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	4	84.2
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	3	84.2
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	8	84.2
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	12	84.2
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	19	84.1
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	2	83.9
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	4	83.9
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	3	83.8
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	8	83.8
(1,9)	1:A:8:VAL:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	10	83.8
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	6	83.8
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	5	83.8
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	16	83.7
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	17	83.6
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	3	83.6
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	9	83.5
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	14	83.5
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	4	83.4
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	12	83.3
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	6	83.0
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	10	83.0
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	13	83.0
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	20	82.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	7	82.9
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	3	82.9
(1,95)	1:A:55:ALA:C	1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:CA	1:A:56:ASP:C	6	82.8
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	4	82.8
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	17	82.8
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	7	82.7
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	14	82.7
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	19	82.7
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	1	82.7
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	8	82.7
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	15	82.6
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	17	82.5
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	11	82.4
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	5	82.4
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	11	82.2
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	16	82.2
(1,38)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	16	82.0
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	20	81.9
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	9	81.8
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	5	81.7
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	10	81.7
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	4	81.7
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	6	81.6
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	4	81.6
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	18	81.4
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	18	81.4
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1	81.3
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	15	81.2
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	13	81.2
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	18	81.2
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	10	81.1
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	14	81.0
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	7	80.9
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	4	80.9
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	8	80.7
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	15	80.6
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	7	80.5
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	10	80.1
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	13	80.1
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	12	80.0
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	17	79.9
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	14	79.8
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	20	79.8
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	20	79.8
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	11	79.6
(1,93)	1:A:53:GLU:C	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1	79.5
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	17	79.5
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	5	79.4
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	12	79.3
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	16	79.2
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	4	79.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	16	78.9
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	11	78.9
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	2	78.8
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	9	78.8
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	7	78.8
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	11	78.7
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	6	78.7
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	10	78.6
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	14	78.2
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	1	78.1
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	9	78.1
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	18	78.1
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	16	78.1
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	15	78.1
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	15	78.0
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	20	78.0
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	2	78.0
(1,113)	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	8	78.0
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	9	78.0
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	13	78.0
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	13	77.9
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	5	77.9
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	14	77.9
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	6	77.8
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	20	77.8
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	9	77.7
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	5	77.6
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	10	77.6
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	9	77.6
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	12	77.5
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	11	77.5
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	5	77.5
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	7	77.5
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	16	77.5
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	6	77.4
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	3	77.4
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	13	77.3
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	14	77.3
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	19	77.2
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	17	77.2
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	19	77.2
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	7	77.2
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	20	77.1
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	12	76.9
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	2	76.8
(1,40)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CA	1:A:25:GLU:C	7	76.8
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	2	76.8
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	2	76.7
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	4	76.6
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	7	76.4
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	9	76.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	19	76.4
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	18	76.4
(1,99)	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	8	76.2
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	10	76.2
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	17	76.0
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	18	76.0
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	19	76.0
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	3	75.9
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	2	75.9
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	10	75.7
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	11	75.7
(1,42)	1:A:25:GLU:C	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	17	75.6
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	3	75.3
(1,115)	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CA	1:A:66:ILE:C	8	74.7
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	8	74.4
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	2	74.4
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	8	74.3
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	8	74.2
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	6	74.2
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	1	74.1
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	16	74.1
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	3	74.1
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	9	73.6
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	3	73.4
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	10	73.3
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	9	73.3
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	5	73.3
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	16	73.2
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	20	73.2
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	8	73.1
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	17	73.1
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	13	73.0
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	19	73.0
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	1	72.9
(1,111)	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	15	72.9
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	14	72.8
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	19	72.8
(1,103)	1:A:59:ARG:C	1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:CA	1:A:60:ASN:C	6	72.8
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	16	72.7
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	19	72.7
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	15	72.6
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	7	72.4
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	7	72.4
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	11	72.3
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	4	72.3
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	3	72.2
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	4	72.2
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	9	72.2
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	18	72.2
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	13	72.2
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	12	72.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	13	72.1
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	20	72.0
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	19	72.0
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	6	71.9
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	10	71.8
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	14	71.7
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	10	71.6
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	3	71.5
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	4	71.2
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1	71.2
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	7	70.9
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	11	70.9
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	20	70.8
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	17	70.5
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	2	70.5
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	12	70.5
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	6	70.3
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	13	70.2
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	9	70.1
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	3	70.1
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	12	70.0
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1	69.9
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	3	69.9
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	8	69.9
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	6	69.8
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	10	69.8
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	14	69.7
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	13	69.5
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	16	69.5
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	14	69.0
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	17	68.8
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	15	68.8
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	12	68.6
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	7	68.5
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	10	68.5
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	2	68.4
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	18	68.3
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	4	68.3
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	17	68.2
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	15	68.1
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	2	67.8
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	5	67.7
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	9	67.7
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	1	67.7
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	14	67.6
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	7	67.6
(1,91)	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	5	67.5
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	11	67.5
(1,101)	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CA	1:A:59:ARG:C	18	67.5
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	18	67.4
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	9	67.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	17	67.3
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	9	67.2
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	15	67.2
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	17	67.2
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	2	67.2
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	12	67.1
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	5	67.1
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	16	67.0
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	8	67.0
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	2	67.0
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	11	66.9
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	5	66.9
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	2	66.9
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	14	66.9
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	13	66.9
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	10	66.8
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	11	66.8
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	4	66.7
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	14	66.7
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	16	66.6
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	18	66.6
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	19	66.5
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	3	66.5
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	19	66.4
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	8	66.4
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	9	66.4
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	7	66.4
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	4	66.3
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1	66.2
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	10	66.1
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	12	66.1
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	20	66.1
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	13	66.1
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	6	66.0
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	11	66.0
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	15	66.0
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	19	65.9
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	4	65.9
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	20	65.8
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	4	65.8
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	6	65.8
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	9	65.8
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	19	65.7
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	5	65.7
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	17	65.7
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	3	65.7
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	10	65.6
(1,64)	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	12	65.6
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	3	65.6
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	15	65.6
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	11	65.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	4	65.5
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	2	65.5
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	12	65.5
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	18	65.5
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	12	65.4
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	3	65.4
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	19	65.4
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	8	65.4
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	5	65.4
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1	65.4
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	10	65.3
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	10	65.3
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	15	65.3
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	13	65.2
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	13	65.2
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	3	65.1
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	14	65.1
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	18	65.1
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	6	65.1
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	4	65.1
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	17	65.1
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	11	65.1
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	7	65.0
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	14	65.0
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	18	65.0
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	14	64.9
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	2	64.9
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	8	64.9
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	10	64.8
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	8	64.8
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	6	64.8
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	14	64.8
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	12	64.7
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	16	64.7
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	20	64.7
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	5	64.7
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	8	64.7
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	15	64.6
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1	64.6
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	5	64.6
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	12	64.6
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	7	64.6
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	10	64.6
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	17	64.5
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	19	64.5
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1	64.5
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	2	64.5
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	16	64.5
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	16	64.4
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	20	64.4
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	8	64.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	11	64.4
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	14	64.4
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	15	64.4
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	3	64.3
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	10	64.3
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	11	64.3
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	20	64.3
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	13	64.2
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	12	64.1
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	20	64.1
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	8	64.1
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	7	64.0
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	11	64.0
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	5	63.9
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	2	63.9
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	3	63.9
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	9	63.9
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	15	63.9
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	16	63.9
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	13	63.8
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	13	63.7
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	9	63.7
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	7	63.7
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	20	63.7
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	12	63.7
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	4	63.6
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	9	63.6
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	11	63.6
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	6	63.6
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	20	63.6
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	7	63.6
(1,48)	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	18	63.6
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	20	63.6
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	19	63.6
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	8	63.6
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	14	63.5
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	7	63.5
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	9	63.5
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	5	63.5
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	12	63.5
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	18	63.4
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	10	63.4
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	3	63.4
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	13	63.4
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	9	63.4
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	11	63.4
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	2	63.3
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	11	63.3
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	6	63.3
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	16	63.3
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	19	63.3

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:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1	63.3
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	19	63.3
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	6	63.2
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	11	63.2
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	16	63.2
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1	63.2
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	17	63.1
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	4	63.1
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	15	63.0
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	16	63.0
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	15	63.0
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	16	63.0
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1	63.0
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	7	63.0
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	3	63.0
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	15	62.9
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	5	62.9
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	12	62.9
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	5	62.9
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	17	62.8
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	8	62.8
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	16	62.8
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	3	62.8
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	13	62.8
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	19	62.8
(1,97)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1	62.7
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	3	62.7
(1,60)	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	18	62.7
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	18	62.7
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	13	62.7
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	2	62.6
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	14	62.6
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	16	62.6
(1,109)	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	17	62.6
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	17	62.5
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1	62.4
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	20	62.4
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	5	62.4
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	7	62.3
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	20	62.3
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	14	62.3
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	4	62.3
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	13	62.2
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	19	62.2
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	15	62.2
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	20	62.2
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	17	62.2
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	18	62.2
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	2	62.1
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	6	62.1
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	8	62.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,71)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1	62.1
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	14	62.0
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	12	62.0
(1,36)	1:A:22:ASP:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	8	62.0
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1	61.9
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	3	61.9
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	19	61.9
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	20	61.9
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	6	61.9
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	12	61.8
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	5	61.7
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	16	61.7
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1	61.7
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	6	61.6
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	6	61.6
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	17	61.5
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	13	61.5
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	18	61.5
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	15	61.5
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	4	61.5
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	7	61.4
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	14	61.4
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	20	61.3
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	18	61.3
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	8	61.3
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	13	61.3
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	11	61.3
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	2	61.2
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	17	61.2
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	17	61.2
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	15	61.2
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	10	61.1
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	5	61.0
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	9	60.9
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	12	60.9
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	5	60.9
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	6	60.9
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1	60.9
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	8	60.9
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	18	60.8
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	15	60.8
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	11	60.6
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	16	60.6
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	9	60.6
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	7	60.6
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	16	60.6
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	3	60.5
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	5	60.4
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	8	60.4
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	20	60.4
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	6	60.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	18	60.4
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	10	60.3
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	9	60.3
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	12	60.2
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	14	60.2
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	18	60.2
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	4	60.2
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	7	60.2
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	19	60.1
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	2	60.1
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	9	60.1
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	3	60.1
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1	60.0
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	11	60.0
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	17	60.0
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1	60.0
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	13	60.0
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	5	59.9
(1,56)	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	17	59.9
(1,50)	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	10	59.9
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	10	59.9
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	9	59.9
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	16	59.8
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	20	59.8
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	7	59.8
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	14	59.8
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	19	59.8
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	2	59.7
(1,88)	1:A:51:GLY:N	1:A:51:GLY:CA	1:A:51:GLY:C	1:A:52:ILE:N	18	59.6
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	13	59.6
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	11	59.5
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	5	59.5
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	15	59.5
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	20	59.5
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	17	59.5
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	3	59.4
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	15	59.4
(1,62)	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	18	59.3
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	11	59.3
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	18	59.3
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	10	59.2
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	15	59.2
(1,58)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	4	59.0
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	12	59.0
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	6	59.0
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	11	59.0
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	20	59.0
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	13	58.9
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	6	58.9
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	10	58.9
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	14	58.8

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:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	13	58.7
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	7	58.6
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	17	58.6
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	11	58.5
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	6	58.4
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	8	58.4
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	10	58.4
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	12	58.4
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	14	58.4
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	9	58.3
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	19	58.3
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	6	58.2
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	19	58.1
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	4	58.0
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	8	57.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	6	57.8
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	2	57.7
(1,69)	1:A:41:PRO:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	7	57.5
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	2	57.4
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	9	57.4
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	8	57.2
(1,75)	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CA	1:A:45:MET:C	1	57.1
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	9	57.1
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	2	57.1
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	20	57.0
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1	56.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	2	56.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	4	56.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	5	56.9
(1,52)	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	19	56.9
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	7	56.9
(1,94)	1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CA	1:A:54:LEU:C	1:A:55:ALA:N	4	56.8
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	6	56.8
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	5	56.8
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	14	56.7
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	2	56.7
(1,44)	1:A:26:THR:C	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	13	56.4
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	16	56.4
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	3	56.2
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	12	56.2
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	3	55.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	7	55.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	13	55.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	16	55.9
(1,54)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	19	55.7
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	15	54.9
(1,134)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:SER:N	15	54.4
(1,105)	1:A:60:ASN:C	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	4	54.4
(1,107)	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	10	54.0
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	3	53.6
(1,46)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	16	53.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	17	53.3
(1,133)	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	4	50.2
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	4	49.6
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	11	46.8
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	2	46.3
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	10	46.3
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	12	46.2
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	5	46.1
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	1	45.9
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	15	45.8
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	16	45.6
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	3	45.4
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	10	45.3
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	7	45.2
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	17	44.9
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	14	44.9
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	18	44.8
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	17	44.7
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	5	44.4
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	11	44.3
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	9	44.3
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	20	44.2
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	10	44.2
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	4	44.0
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	15	44.0
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	3	44.0
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	4	43.9
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	19	43.9
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	19	43.8
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	19	43.7
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	12	43.6
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	1	43.5
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	2	43.2
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	13	43.2
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	16	43.0
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	3	42.7
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	9	42.7
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	6	42.5
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	7	42.5
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	17	42.5
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	8	42.4
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	18	42.4
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	7	42.2
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	18	42.2
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	14	42.1
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	9	41.9
(1,55)	1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:CA	1:A:32:ASP:C	1:A:33:LYS:N	17	41.8
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	6	41.8
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	10	41.8
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	16	41.7
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	6	41.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	2	41.6
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	8	41.5
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	13	41.5
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	20	41.5
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	15	41.3
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	3	41.1
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	4	41.1
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	4	41.1
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	2	40.9
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	19	40.8
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	17	40.8
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	1	40.8
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	9	40.7
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	20	40.7
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	11	40.6
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	7	40.6
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	13	40.5
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	3	40.5
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	16	40.4
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	14	40.4
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	4	40.4
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	20	40.4
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	20	40.3
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	7	40.3
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	9	40.3
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	11	40.3
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	8	40.2
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	14	40.2
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	13	40.2
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	9	40.1
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	10	40.0
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	6	39.9
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	17	39.9
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	19	39.9
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	5	39.9
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	10	39.8
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	13	39.8
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	7	39.8
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	16	39.8
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	14	39.8
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	5	39.7
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	1	39.7
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	5	39.7
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	1	39.7
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	9	39.6
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	13	39.6
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	14	39.5
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	16	39.5
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	1	39.4
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	4	39.4
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	2	39.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	6	39.3
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	18	39.3
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	8	39.2
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	13	39.2
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	5	39.1
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	7	39.1
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	20	39.1
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	11	39.1
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	15	39.1
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	6	39.1
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	8	39.1
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	13	39.1
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	19	39.1
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	19	39.1
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	6	39.0
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	8	39.0
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	16	39.0
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	1	39.0
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	16	39.0
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	3	38.9
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	11	38.9
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	10	38.9
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	3	38.9
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	17	38.9
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	18	38.9
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	5	38.9
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	15	38.8
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	2	38.8
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	16	38.8
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	5	38.8
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	12	38.7
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	18	38.7
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	2	38.7
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	12	38.6
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	15	38.6
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	3	38.6
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	15	38.6
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	20	38.5
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	4	38.5
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	20	38.5
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	18	38.5
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	18	38.3
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	6	38.3
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	15	38.3
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	5	38.3
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	14	38.2
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	18	38.2
(1,63)	1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CA	1:A:36:ILE:C	1:A:37:VAL:N	19	38.2
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	15	38.2
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	19	38.2
(1,51)	1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CA	1:A:30:LEU:C	1:A:31:LYS:N	14	38.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	19	38.1
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	11	38.0
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	8	38.0
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	12	38.0
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	9	38.0
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	12	38.0
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	1	37.9
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	5	37.9
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	17	37.8
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	15	37.8
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	7	37.8
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	3	37.7
(1,65)	1:A:37:VAL:N	1:A:37:VAL:CA	1:A:37:VAL:C	1:A:38:GLU:N	15	37.6
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	2	37.5
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	10	37.5
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	4	37.5
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	1	37.4
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	12	37.4
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	4	37.3
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	18	37.3
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	18	37.3
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	8	37.2
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	10	37.2
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	11	37.2
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	12	37.1
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	12	37.0
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	11	37.0
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	13	37.0
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	3	36.9
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	6	36.9
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	20	36.9
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	12	36.9
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	15	36.9
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	6	36.9
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	19	36.8
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	5	36.8
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	13	36.7
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	2	36.7
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	6	36.6
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	17	36.5
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	10	36.5
(1,59)	1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CA	1:A:34:ILE:C	1:A:35:HIS:N	2	36.5
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	2	36.5
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	16	36.5
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	7	36.5
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	10	36.4
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	9	36.4
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	12	36.3
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	7	36.3
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	8	36.3
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	12	36.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	14	36.3
(1,106)	1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CA	1:A:61:LEU:C	1:A:62:ASN:N	8	36.1
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	17	36.0
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	16	36.0
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	8	36.0
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	6	35.9
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	8	35.9
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	16	35.8
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	11	35.8
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	20	35.8
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	1	35.7
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	17	35.7
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	20	35.7
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	7	35.6
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	4	35.6
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	11	35.6
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	18	35.6
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	3	35.6
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	7	35.6
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	13	35.6
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	5	35.5
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	12	35.5
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	4	35.3
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	4	35.3
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	7	35.2
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	1	35.2
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	18	35.1
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	20	35.1
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	3	35.0
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	14	35.0
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	14	34.9
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	2	34.8
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	9	34.8
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	16	34.8
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	13	34.8
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	9	34.7
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	2	34.6
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	9	34.5
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	1	34.4
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	14	34.4
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	8	34.4
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	8	34.3
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	2	34.3
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	2	34.1
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	20	34.1
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	14	34.1
(1,108)	1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:CA	1:A:62:ASN:C	1:A:63:GLU:N	17	34.1
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	10	33.7
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	10	33.7
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	2	33.7
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	5	33.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	15	33.6
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	13	33.6
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	1	33.5
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	6	33.4
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	6	33.4
(1,57)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:ILE:N	18	33.3
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	13	33.2
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	15	33.2
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	11	33.2
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	13	33.2
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	13	33.2
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	17	33.2
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	12	33.2
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	5	33.1
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	17	33.0
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	3	33.0
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	3	33.0
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	10	33.0
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	16	32.8
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	20	32.7
(1,49)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:LEU:N	16	32.6
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	3	32.6
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	6	32.5
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	7	32.4
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	15	32.2
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	11	32.1
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	12	31.9
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	11	31.8
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	9	31.8
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	14	31.7
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	8	31.7
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	17	31.4
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	3	31.2
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	18	31.1
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	14	31.1
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	4	31.0
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	12	30.8
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	15	30.6
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	7	30.5
(1,53)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:ASP:N	9	30.5
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	5	30.5
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	11	30.4
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	14	30.4
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	3	30.4
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	12	30.4
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	12	30.3
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	4	30.0
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	19	29.9
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	18	29.8
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	20	29.8
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	2	29.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	19	29.6
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	16	29.6
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	13	29.5
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	10	29.4
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	20	29.3
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	11	29.3
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	11	29.3
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	13	29.3
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	10	29.1
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	10	29.1
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	14	29.1
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	16	29.0
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	19	29.0
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	3	29.0
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	3	29.0
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	6	29.0
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	16	28.9
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	17	28.9
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	19	28.9
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	9	28.9
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	20	28.9
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	19	28.8
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	2	28.8
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	12	28.7
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	19	28.7
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	1	28.6
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	1	28.6
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	11	28.6
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	14	28.6
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	7	28.5
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	9	28.4
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	10	28.3
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	15	28.3
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	8	28.2
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	7	28.2
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	2	28.2
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	15	28.2
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	7	28.2
(1,61)	1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:CA	1:A:35:HIS:C	1:A:36:ILE:N	19	28.1
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	8	28.1
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	20	28.0
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	11	27.9
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	20	27.8
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	6	27.8
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	13	27.7
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	2	27.6
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	14	27.4
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	11	27.2
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	8	27.1
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	16	26.8
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	9	26.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	6	26.7
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	17	26.6
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	1	26.6
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	7	26.6
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	4	26.4
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	6	26.4
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	18	26.2
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	4	26.2
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	17	26.1
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	9	26.0
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1	26.0
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	20	26.0
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1	25.7
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	18	25.7
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	17	25.7
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	5	25.6
(1,74)	1:A:44:ARG:N	1:A:44:ARG:CA	1:A:44:ARG:C	1:A:45:MET:N	9	25.6
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	13	25.5
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	17	25.5
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	19	25.4
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	6	25.4
(1,98)	1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:CA	1:A:57:ASP:C	1:A:58:TYR:N	4	25.3
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	10	25.3
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	13	25.3
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	18	25.1
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	15	25.0
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	5	25.0
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	14	24.9
(1,47)	1:A:28:SER:N	1:A:28:SER:CA	1:A:28:SER:C	1:A:29:SER:N	5	24.9
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	1	24.7
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	10	24.6
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	19	24.4
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	9	24.4
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	12	24.3
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	6	24.3
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	19	24.3
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	1	24.3
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	4	24.2
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	18	24.2
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	18	24.2
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	19	24.1
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	5	24.1
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	7	24.0
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	8	24.0
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	8	23.8
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	14	23.8
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	1	23.6
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	17	23.6
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	16	23.3
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	5	23.2
(1,17)	1:A:13:PRO:N	1:A:13:PRO:CA	1:A:13:PRO:C	1:A:14:SER:N	16	23.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	13	23.2
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	3	23.1
(1,110)	1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CA	1:A:63:GLU:C	1:A:64:TYR:N	4	23.0
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	17	22.8
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	19	22.6
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	18	22.5
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	1	22.4
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	19	22.3
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	11	22.2
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	8	22.2
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	2	22.0
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	20	22.0
(1,70)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LYS:N	18	22.0
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	5	21.5
(1,114)	1:A:65:GLY:N	1:A:65:GLY:CA	1:A:65:GLY:C	1:A:66:ILE:N	4	21.5
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	12	21.4
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	20	21.3
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	9	21.1
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	5	21.1
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	6	21.0
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	7	21.0
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	13	21.0
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	4	21.0
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	8	20.9
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	11	20.8
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	17	20.7
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	15	20.6
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	12	20.4
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	14	20.4
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	3	20.3
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	10	20.3
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	11	20.3
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	2	20.2
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	14	20.2
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	1	20.1
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	8	20.1
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	10	20.0
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	16	19.9
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	13	19.5
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	15	19.5
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	2	19.4
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	3	19.4
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	6	19.4
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	11	19.4
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	19	19.4
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	20	19.4
(1,37)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	4	19.3
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	6	19.3
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	7	19.3
(1,85)	1:A:49:TYR:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	15	19.2
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	15	19.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	18	19.0
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	14	19.0
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	9	18.9
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	10	18.9
(1,72)	1:A:43:LYS:N	1:A:43:LYS:CA	1:A:43:LYS:C	1:A:44:ARG:N	5	18.8
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	5	18.8
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	7	18.7
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	9	18.6
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	12	18.5
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	16	18.5
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	1	18.4
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	7	18.1
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	9	18.1
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	2	17.9
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	12	17.4
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	16	17.0
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	4	16.8
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	6	16.1
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	7	16.1
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	17	15.7
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	3	15.6
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	10	15.6
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	10	14.4
(1,45)	1:A:27:VAL:N	1:A:27:VAL:CA	1:A:27:VAL:C	1:A:28:SER:N	3	14.0
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	16	12.7
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	8	12.3
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	9	12.3
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	11	12.1
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	7	12.1
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	18	11.6
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	8	11.6
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	4	11.1
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	5	11.1
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	9	10.6
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	15	10.4
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	10	10.1
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	1	9.8
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	13	9.2
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	12	8.9
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	14	8.6
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	16	8.6
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	1	8.5
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	13	8.3
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	15	8.3
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	2	8.3
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	17	8.2
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	20	8.1
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	5	8.0
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	11	7.5
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	20	7.3
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	5	7.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	7	7.2
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	6	7.1
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	4	7.0
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	17	7.0
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	3	6.8
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	18	6.7
(1,112)	1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CA	1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLY:N	8	6.7
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	19	6.6
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	4	6.6
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	6	6.6
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	2	6.3
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	15	6.3
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	20	6.0
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	15	5.5
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	10	5.4
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	3	5.4
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	19	5.4
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	13	5.3
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	11	4.9
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	12	4.9
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	14	4.9
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	2	4.9
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	20	4.9
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	3	4.8
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	8	4.7
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	9	4.7
(1,39)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLU:N	16	4.6
(1,19)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:LYS:N	12	3.8
(1,120)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:SER:N	17	2.9
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	18	2.3
(1,100)	1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CA	1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:N	1	1.9