



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Sep 22, 2026 – 04:38 PM JST

PDB ID : 46AF / pdb\_000046af  
BMRB ID : 36877  
Title : solution NMR structure of de novo lasso protein HF360  
Authors : Yurui, Z.; Yajun, J.; Hongwei, Y.; Peng, Z.  
Deposited on : 2026-09-16

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0  
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)  
wwPDB-RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
wwPDB-ShiftChecker : v1.2  
BMRB Restraints Analysis : v1.2.1  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.50

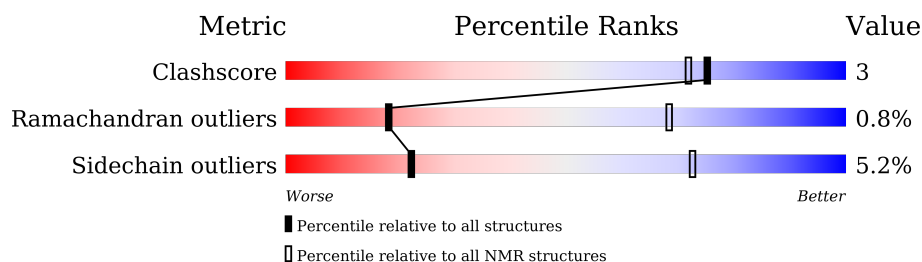
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 55%.

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<br>(#Entries) | NMR archive<br>(#Entries) |
|-----------------------|-----------------------------|---------------------------|
| Clashscore            | 229148                      | 14424                     |
| Ramachandran outliers | 224038                      | 12848                     |
| Sidechain outliers    | 223484                      | 12823                     |

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1   | A     | 160    |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 18 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:123, A:130-A:152<br>(143) | 0.78              | 18           |

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2552 atoms, of which 1294 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called HF360.

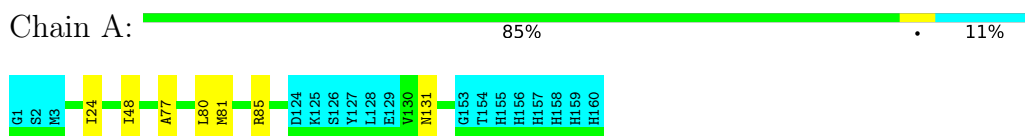
| Mol | Chain | Residues | Atoms |     |      |     |     |   | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|---|-------|
| 1   | A     | 160      | Total | C   | H    | N   | O   | S | 0     |
|     |       |          | 2552  | 785 | 1294 | 216 | 252 | 5 |       |

## 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: HF360

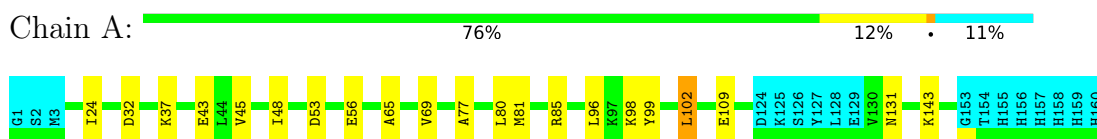


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

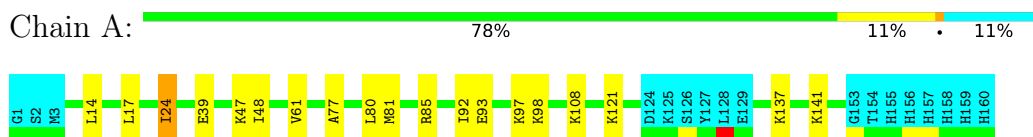
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: HF360



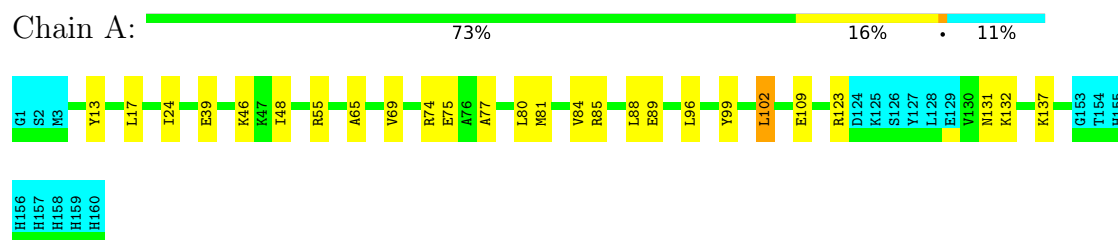
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: HF360



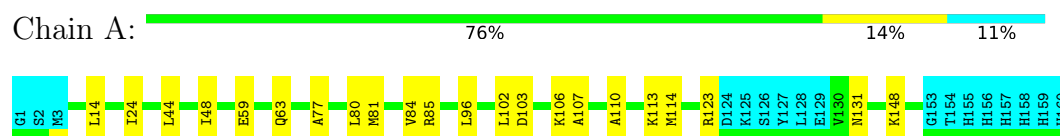
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: HF360



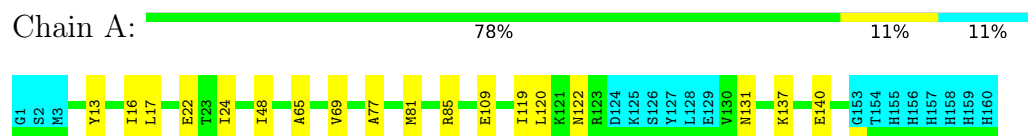
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: HF360



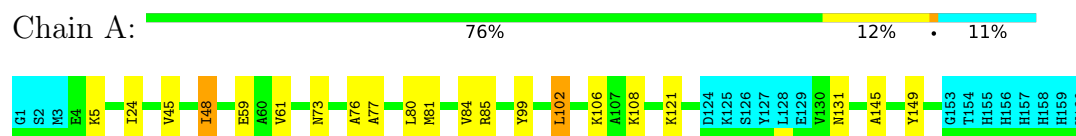
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: HF360



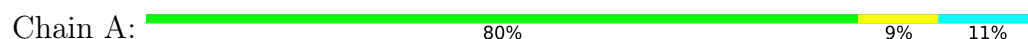
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: HF360



### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: HF360





#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: HF360

Chain A: 79% 10% 11%



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: HF360

Chain A: 77% 12% 11%



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: HF360

Chain A: 79% 9% 11%



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

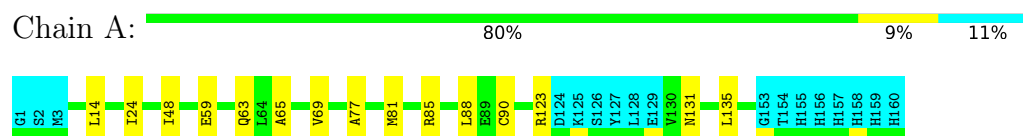
- Molecule 1: HF360

Chain A: 76% 14% 11%



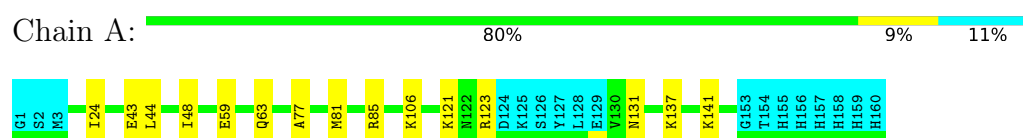
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: HF360



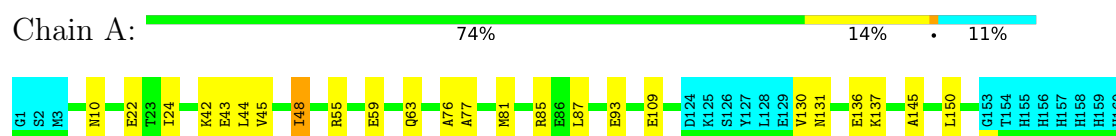
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: HF360



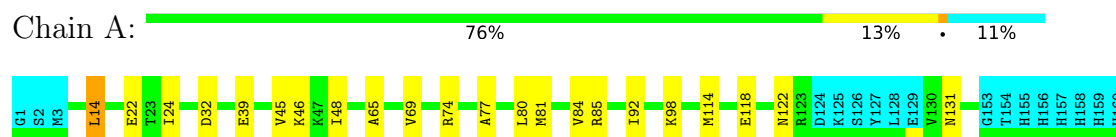
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: HF360



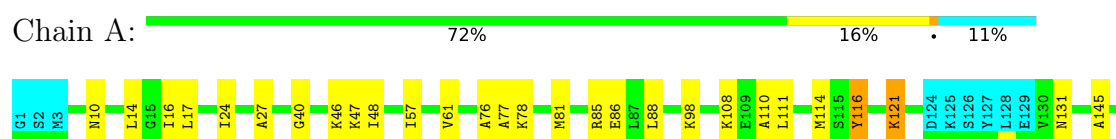
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: HF360



#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: HF360





#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: HF360

Chain A: 80% 9% 11%



#### 4.2.18 Score per residue for model 18 (medoid)

- Molecule 1: HF360

Chain A: 73% 16% 11%



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: HF360

Chain A: 78% 9% 11%



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: HF360

Chain A: 79% 11% 11%



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *all calculated structures submitted*.

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

| Software name | Classification        | Version |
|---------------|-----------------------|---------|
| CNS           | refinement            |         |
| CYANA         | structure calculation |         |

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                       | 1533           |
| Number of shifts mapped to atoms             | 1533           |
| Number of unparsed shifts                    | 0              |
| Number of shifts with mapping errors         | 0              |
| Number of shifts with mapping warnings       | 0              |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 55%            |

## 6 Model quality [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

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

| Mol | Chain | Bond lengths |                       | Bond angles |                       |
|-----|-------|--------------|-----------------------|-------------|-----------------------|
|     |       | RMSZ         | #Z>5                  | RMSZ        | #Z>5                  |
| 1   | A     | 1.22±0.03    | 0±0/1122 ( 0.0± 0.0%) | 1.13±0.02   | 0±0/1504 ( 0.0± 0.0%) |
| All | All   | 1.22         | 2/22440 ( 0.0%)       | 1.13        | 0/30080 ( 0.0%)       |

All unique bond outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z    | Observed(Å) | Ideal(Å) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|-------|------|-------------|----------|--------|-------|
|     |       |     |      |       |      |             |          | Worst  | Total |
| 1   | A     | 24  | ILE  | CA-CB | 5.14 | 1.60        | 1.54     | 2      | 2     |

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     | 1116  | 1169     | 1169     | 7±2     |
| All | All   | 22320 | 23380    | 23380    | 141     |

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 3.

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

| Atom-1          | Atom-2          | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
|                 |                 |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:92:ILE:HD13 | 0.67     | 1.66        | 19     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                 |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:48:ILE:HG13 | 1:A:57:ILE:HG13  | 0.62     | 1.72        | 16     | 1     |
| 1:A:24:ILE:HG21 | 1:A:85:ARG:HB2   | 0.62     | 1.70        | 8      | 19    |
| 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:80:LEU:HD23  | 0.60     | 1.72        | 20     | 1     |
| 1:A:77:ALA:O    | 1:A:81:MET:HG3   | 0.55     | 2.02        | 9      | 19    |
| 1:A:46:LYS:HE2  | 1:A:46:LYS:HA    | 0.55     | 1.79        | 16     | 1     |
| 1:A:32:ASP:HA   | 1:A:74:ARG:NH1   | 0.54     | 2.18        | 15     | 1     |
| 1:A:27:ALA:HB1  | 1:A:81:MET:SD    | 0.54     | 2.43        | 11     | 2     |
| 1:A:14:LEU:HG   | 1:A:92:ILE:HD11  | 0.53     | 1.78        | 2      | 2     |
| 1:A:103:ASP:HB2 | 1:A:106:LYS:HG2  | 0.53     | 1.80        | 4      | 1     |
| 1:A:16:ILE:HD11 | 1:A:119:ILE:HD13 | 0.53     | 1.81        | 5      | 1     |
| 1:A:48:ILE:HG13 | 1:A:61:VAL:HB    | 0.53     | 1.80        | 19     | 1     |
| 1:A:31:VAL:HG23 | 1:A:69:VAL:HG21  | 0.53     | 1.79        | 11     | 1     |
| 1:A:48:ILE:HD12 | 1:A:80:LEU:HD21  | 0.52     | 1.80        | 10     | 1     |
| 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:88:LEU:HB2   | 0.52     | 1.81        | 16     | 1     |
| 1:A:43:GLU:HG2  | 1:A:44:LEU:HD12  | 0.52     | 1.82        | 18     | 1     |
| 1:A:53:ASP:HB3  | 1:A:55:ARG:HG2   | 0.50     | 1.84        | 9      | 1     |
| 1:A:42:LYS:HE2  | 1:A:150:LEU:HD22 | 0.50     | 1.83        | 14     | 1     |
| 1:A:43:GLU:HG3  | 1:A:44:LEU:HD22  | 0.49     | 1.84        | 14     | 2     |
| 1:A:96:LEU:HD12 | 1:A:102:LEU:HD21 | 0.49     | 1.83        | 1      | 2     |
| 1:A:76:ALA:O    | 1:A:145:ALA:HB1  | 0.49     | 2.07        | 14     | 3     |
| 1:A:93:GLU:HG3  | 1:A:130:VAL:HG21 | 0.49     | 1.83        | 18     | 1     |
| 1:A:65:ALA:HA   | 1:A:69:VAL:HB    | 0.49     | 1.84        | 5      | 5     |
| 1:A:61:VAL:HG22 | 1:A:81:MET:HG2   | 0.48     | 1.84        | 16     | 2     |
| 1:A:93:GLU:HB3  | 1:A:130:VAL:HG21 | 0.48     | 1.84        | 14     | 1     |
| 1:A:114:MET:SD  | 1:A:122:ASN:ND2  | 0.48     | 2.87        | 15     | 1     |
| 1:A:99:TYR:O    | 1:A:102:LEU:HD22 | 0.47     | 2.10        | 17     | 5     |
| 1:A:31:VAL:HG22 | 1:A:74:ARG:HD2   | 0.47     | 1.85        | 11     | 1     |
| 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:80:LEU:HD22  | 0.46     | 1.87        | 2      | 2     |
| 1:A:13:TYR:O    | 1:A:17:LEU:HD13  | 0.46     | 2.11        | 5      | 4     |
| 1:A:114:MET:HG3 | 1:A:118:GLU:HB2  | 0.46     | 1.86        | 15     | 1     |
| 1:A:55:ARG:HD3  | 1:A:120:LEU:HD11 | 0.46     | 1.87        | 9      | 1     |
| 1:A:45:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:HD22  | 0.45     | 1.88        | 9      | 1     |
| 1:A:48:ILE:HD11 | 1:A:84:VAL:HG22  | 0.45     | 1.89        | 19     | 1     |
| 1:A:45:VAL:O    | 1:A:48:ILE:HG22  | 0.45     | 2.12        | 6      | 1     |
| 1:A:39:GLU:HG2  | 1:A:70:THR:HG21  | 0.45     | 1.88        | 19     | 1     |
| 1:A:26:ALA:O    | 1:A:30:ARG:HD3   | 0.45     | 2.11        | 9      | 2     |
| 1:A:110:ALA:O   | 1:A:114:MET:HG2  | 0.44     | 2.12        | 11     | 4     |
| 1:A:80:LEU:O    | 1:A:84:VAL:HG23  | 0.44     | 2.12        | 4      | 8     |
| 1:A:59:GLU:O    | 1:A:63:GLN:HG2   | 0.44     | 2.12        | 12     | 6     |
| 1:A:85:ARG:O    | 1:A:89:GLU:HG2   | 0.44     | 2.13        | 11     | 2     |
| 1:A:96:LEU:HG   | 1:A:102:LEU:HD21 | 0.44     | 1.89        | 4      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1          | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                 |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:42:LYS:O    | 1:A:45:VAL:HG12  | 0.44     | 2.12        | 8      | 1     |
| 1:A:73:ASN:HB2  | 1:A:149:TYR:HA   | 0.43     | 1.90        | 18     | 2     |
| 1:A:45:VAL:HA   | 1:A:48:ILE:HG22  | 0.43     | 1.90        | 14     | 1     |
| 1:A:90:CYS:SG   | 1:A:135:LEU:HB2  | 0.43     | 2.53        | 12     | 1     |
| 1:A:91:GLU:HA   | 1:A:94:ASN:HD22  | 0.42     | 1.75        | 17     | 1     |
| 1:A:42:LYS:O    | 1:A:45:VAL:HG22  | 0.42     | 2.15        | 20     | 1     |
| 1:A:48:ILE:HG21 | 1:A:80:LEU:HD21  | 0.42     | 1.92        | 8      | 1     |
| 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:92:ILE:HB    | 0.42     | 1.92        | 2      | 1     |
| 1:A:85:ARG:O    | 1:A:88:LEU:HG    | 0.42     | 2.15        | 12     | 1     |
| 1:A:74:ARG:HG3  | 1:A:75:GLU:N     | 0.41     | 2.30        | 3      | 1     |
| 1:A:53:ASP:HB2  | 1:A:56:GLU:HB2   | 0.41     | 1.93        | 1      | 1     |
| 1:A:55:ARG:O    | 1:A:59:GLU:HG2   | 0.41     | 2.15        | 18     | 2     |
| 1:A:137:LYS:O   | 1:A:141:LYS:HG2  | 0.41     | 2.15        | 2      | 2     |
| 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:107:ALA:HB2  | 0.41     | 1.91        | 4      | 1     |
| 1:A:92:ILE:HD12 | 1:A:95:ILE:HB    | 0.41     | 1.91        | 7      | 1     |
| 1:A:82:LYS:O    | 1:A:86:GLU:HG2   | 0.41     | 2.16        | 17     | 1     |
| 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:55:ARG:HB3   | 0.41     | 1.93        | 18     | 1     |
| 1:A:93:GLU:O    | 1:A:97:LYS:HG2   | 0.41     | 2.16        | 2      | 1     |
| 1:A:42:LYS:HD3  | 1:A:43:GLU:N     | 0.40     | 2.31        | 10     | 1     |
| 1:A:96:LEU:HD23 | 1:A:102:LEU:HD11 | 0.40     | 1.94        | 3      | 1     |
| 1:A:16:ILE:HD12 | 1:A:116:TYR:CE1  | 0.40     | 2.52        | 16     | 1     |
| 1:A:45:VAL:HG23 | 1:A:80:LEU:HD11  | 0.40     | 1.94        | 1      | 1     |
| 1:A:121:LYS:HA  | 1:A:121:LYS:HE3  | 0.40     | 1.92        | 16     | 1     |

## 6.3 Torsion angles [i](#)

### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed        | Favoured      | Allowed    | Outliers   | Percentiles |    |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|------------|-------------|----|
| 1   | A     | 143/160 (89%)   | 139±1 (97±1%) | 3±1 (2±1%) | 1±1 (1±0%) | 18          | 68 |
| All | All   | 2860/3200 (89%) | 2775 (97%)    | 63 (2%)    | 22 (1%)    | 18          | 68 |

All 3 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 131 | ASN  | 17             |
| 1   | A     | 123 | ARG  | 4              |
| 1   | A     | 40  | GLY  | 1              |

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

| Mol | Chain | Analysed        | Rotameric     | Outliers   | Percentiles |    |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|-------------|----|
| 1   | A     | 117/132 (89%)   | 111±2 (95±2%) | 6±2 (5±2%) | 22          | 72 |
| All | All   | 2340/2640 (89%) | 2218 (95%)    | 122 (5%)   | 22          | 72 |

All 47 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 48  | ILE  | 19             |
| 1   | A     | 109 | GLU  | 5              |
| 1   | A     | 39  | GLU  | 5              |
| 1   | A     | 121 | LYS  | 5              |
| 1   | A     | 22  | GLU  | 5              |
| 1   | A     | 14  | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 43  | GLU  | 4              |
| 1   | A     | 108 | LYS  | 4              |
| 1   | A     | 137 | LYS  | 4              |
| 1   | A     | 106 | LYS  | 4              |
| 1   | A     | 37  | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 98  | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 102 | LEU  | 3              |
| 1   | A     | 55  | ARG  | 3              |
| 1   | A     | 123 | ARG  | 3              |
| 1   | A     | 5   | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 141 | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 42  | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 47  | LYS  | 2              |
| 1   | A     | 46  | LYS  | 2              |
| 1   | A     | 120 | LEU  | 2              |
| 1   | A     | 59  | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 87  | LEU  | 2              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 82  | LYS  | 2              |
| 1   | A     | 78  | LYS  | 2              |
| 1   | A     | 132 | LYS  | 2              |
| 1   | A     | 10  | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 32  | ASP  | 1              |
| 1   | A     | 143 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 88  | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 44  | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 113 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 148 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 122 | ASN  | 1              |
| 1   | A     | 140 | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 6   | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 79  | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 133 | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 136 | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 45  | VAL  | 1              |
| 1   | A     | 86  | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 111 | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 116 | TYR  | 1              |
| 1   | A     | 4   | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 96  | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 97  | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 150 | LEU  | 1              |

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

### 6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

### 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

### 6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 55% for the well-defined parts and 52% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: *chem\_shift\_list\_1*

#### 7.1.1 Bookkeeping

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

|                                         |      |
|-----------------------------------------|------|
| Total number of shifts                  | 1533 |
| Number of shifts mapped to atoms        | 1533 |
| 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    |

- Can not parse the chemical shift value. All 390 occurrences are reported below.

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 1   | GLY  | HA2  | 4.117      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 1   | GLY  | HA3  | 4.046      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 2   | SER  | HB2  | 3.981      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 2   | SER  | HB3  | 3.921      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 3   | MET  | HB2  | 2.637      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 3   | MET  | HB3  | 2.095      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 4   | GLU  | HB2  | 2.075      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 4   | GLU  | HG2  | 2.328      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 5   | LYS  | HB2  | 1.850      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 5   | LYS  | HB3  | 1.776      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 6   | LYS  | HB2  | 1.913      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HB2  | 1.751      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HB3  | 1.593      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HD11 | 0.903      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HD12 | 0.903      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HD13 | 0.903      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HD21 | 0.797      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HD22 | 0.797      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | HD23 | 0.797      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | CD1  | 25.092     | 0.07        | .         |
| 1       | A     | 7   | LEU  | CD2  | 23.859     | 0.12        | .         |
| 1       | A     | 8   | GLU  | HB2  | 2.038      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 8   | GLU  | HG2  | 2.303      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 10  | ASN  | HB2  | 2.743      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 10  | ASN  | HB3  | 2.257      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 10  | ASN  | HD21 | 6.626      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 10  | ASN  | HD22 | 6.313      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HB2  | 1.838      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HB3  | 1.606      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HD11 | 0.784      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HD12 | 0.784      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HD13 | 0.784      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HD21 | 0.879      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HD22 | 0.879      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | HD23 | 0.879      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 11  | LEU  | CD1  | 23.501     | 0.08        | .         |
| 1       | A     | 13  | TYR  | HB2  | 3.083      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 13  | TYR  | HB3  | 3.034      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 13  | TYR  | HD1  | 6.894      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HB2  | 2.045      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HB3  | 1.950      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HD11 | 0.897      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HD12 | 0.897      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HD13 | 0.897      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HD21 | 0.875      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HD22 | 0.875      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | HD23 | 0.875      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 14  | LEU  | CD1  | 25.688     | 0.07        | .         |
| 1       | A     | 15  | GLY  | HA2  | 3.643      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 15  | GLY  | HA3  | 3.507      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 16  | ILE  | HG12 | 1.877      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 16  | ILE  | HG13 | 1.381      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 17  | LEU  | HB2  | 1.194      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 17  | LEU  | HD21 | 0.806      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 17  | LEU  | HD22 | 0.806      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 17  | LEU  | HD23 | 0.806      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 17  | LEU  | CD2  | 23.489     | 0.06        | .         |
| 1       | A     | 18  | LEU  | HB2  | 1.934      | 0.01        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 18  | LEU  | HB3  | 1.493      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 18  | LEU  | HD21 | 0.872      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 18  | LEU  | HD22 | 0.872      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 18  | LEU  | HD23 | 0.872      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 18  | LEU  | CD2  | 22.444     | 0.14        | .         |
| 1       | A     | 19  | GLU  | HB2  | 2.120      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 19  | GLU  | HG2  | 2.374      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 20  | SER  | HB2  | 4.208      | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 21  | LEU  | HB2  | 1.953      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 21  | LEU  | HB3  | 1.543      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 21  | LEU  | CD1  | 25.072     | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 22  | GLU  | HB2  | 2.326      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 22  | GLU  | HB3  | 2.077      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 22  | GLU  | HG2  | 2.547      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 24  | ILE  | HG12 | 1.795      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 24  | ILE  | HG13 | 1.084      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 25  | ASP  | HB2  | 2.756      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 25  | ASP  | HB3  | 2.556      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HB2  | 2.005      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HB3  | 1.484      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HD11 | 0.998      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HD12 | 0.998      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HD13 | 0.998      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HD21 | 0.904      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HD22 | 0.904      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | HD23 | 0.904      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | CD1  | 25.822     | 0.12        | .         |
| 1       | A     | 28  | LEU  | CD2  | 24.854     | 1.05        | .         |
| 1       | A     | 30  | ARG  | HB2  | 2.062      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 30  | ARG  | HB3  | 1.999      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 30  | ARG  | HD2  | 3.237      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 30  | ARG  | HD3  | 3.103      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 31  | VAL  | HG11 | 1.125      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 31  | VAL  | HG12 | 1.125      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 31  | VAL  | HG13 | 1.125      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 31  | VAL  | CG1  | 22.241     | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 32  | ASP  | HB2  | 2.755      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 32  | ASP  | HB3  | 2.580      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 34  | GLU  | HB2  | 2.046      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 34  | GLU  | HB3  | 1.966      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 34  | GLU  | HG2  | 2.293      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 35  | VAL  | HG11 | 0.922      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 35  | VAL  | HG12 | 0.922      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 35  | VAL  | HG13 | 0.922      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 35  | VAL  | HG21 | 0.904      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 35  | VAL  | HG22 | 0.904      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 35  | VAL  | HG23 | 0.904      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 35  | VAL  | CG1  | 21.935     | 0.04        | .         |
| 1       | A     | 35  | VAL  | CG2  | 19.490     | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 37  | LYS  | HB2  | 1.976      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 38  | GLU  | HB2  | 2.061      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 38  | GLU  | HB3  | 1.923      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 38  | GLU  | HG2  | 2.268      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 39  | GLU  | HB2  | 2.071      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 39  | GLU  | HB3  | 1.968      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 39  | GLU  | HG2  | 2.268      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 40  | GLY  | HA2  | 4.222      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 40  | GLY  | HA3  | 4.014      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 41  | GLY  | HA2  | 4.236      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 41  | GLY  | HA3  | 3.972      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 42  | LYS  | HB3  | 1.881      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 43  | GLU  | HB2  | 2.053      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 43  | GLU  | HG2  | 2.343      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 44  | LEU  | HB2  | 1.998      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 44  | LEU  | HB3  | 1.319      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 44  | LEU  | CD2  | 22.699     | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | HG11 | 0.920      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | HG12 | 0.920      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | HG13 | 0.920      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | HG21 | 0.943      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | HG22 | 0.943      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | HG23 | 0.943      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | CG1  | 24.495     | 0.14        | .         |
| 1       | A     | 45  | VAL  | CG2  | 22.820     | 0.08        | .         |
| 1       | A     | 46  | LYS  | HB2  | 1.858      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 47  | LYS  | HB2  | 1.911      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 48  | ILE  | HG12 | 1.926      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 48  | ILE  | HG13 | 0.892      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 49  | LEU  | HB2  | 1.918      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 49  | LEU  | HB3  | 1.493      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 50  | GLU  | HB2  | 2.082      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 50  | GLU  | HB3  | 1.956      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 50  | GLU  | HG2  | 2.466      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 51  | SER  | HB2  | 3.955      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 51  | SER  | HB3  | 3.698      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 53  | ASP  | HB2  | 2.920      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 53  | ASP  | HB3  | 2.719      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 54  | PRO  | HB2  | 2.263      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 54  | PRO  | HB3  | 1.855      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 54  | PRO  | HD2  | 4.357      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 54  | PRO  | HD3  | 4.109      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 54  | PRO  | HG2  | 2.062      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 54  | PRO  | HG3  | 1.974      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 55  | ARG  | HB2  | 1.828      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 55  | ARG  | HB3  | 1.775      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 55  | ARG  | HD2  | 2.876      | 0.04        | .         |
| 1       | A     | 55  | ARG  | HD3  | 2.788      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 55  | ARG  | HG3  | 1.560      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 56  | GLU  | HB2  | 2.236      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 56  | GLU  | HB3  | 2.164      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 56  | GLU  | HG2  | 2.376      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 57  | ILE  | HG12 | 1.859      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 57  | ILE  | HG13 | 1.034      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 59  | GLU  | HB2  | 2.106      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 59  | GLU  | HB3  | 2.010      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 59  | GLU  | HG2  | 2.380      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | HG11 | 0.996      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | HG12 | 0.996      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | HG13 | 0.996      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | HG21 | 0.938      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | HG22 | 0.938      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | HG23 | 0.938      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | CG1  | 24.106     | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 61  | VAL  | CG2  | 22.949     | 0.07        | .         |
| 1       | A     | 63  | GLN  | HB2  | 2.213      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 63  | GLN  | HB3  | 2.080      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 63  | GLN  | HG2  | 2.555      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 63  | GLN  | HG3  | 2.386      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 64  | LEU  | HB2  | 1.924      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 64  | LEU  | HB3  | 1.558      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 64  | LEU  | HD11 | 0.441      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 64  | LEU  | HD12 | 0.441      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 64  | LEU  | HD13 | 0.441      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 64  | LEU  | CD1  | 25.218     | 0.09        | .         |
| 1       | A     | 66  | GLU  | HB2  | 2.149      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 66  | GLU  | HB3  | 2.109      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 66  | GLU  | HG2  | 2.292      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 68  | GLY  | HA2  | 4.675      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 68  | GLY  | HA3  | 3.683      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 69  | VAL  | HG11 | 0.946      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 69  | VAL  | HG12 | 0.946      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 69  | VAL  | HG13 | 0.946      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 69  | VAL  | HG21 | 0.920      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 69  | VAL  | HG22 | 0.920      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 69  | VAL  | HG23 | 0.920      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 69  | VAL  | CG1  | 22.474     | 0.06        | .         |
| 1       | A     | 71  | GLU  | HB2  | 2.063      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 71  | GLU  | HG2  | 2.346      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 72  | GLU  | HB3  | 1.972      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 72  | GLU  | HG2  | 2.324      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 73  | ASN  | HB2  | 3.055      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 73  | ASN  | HB3  | 2.339      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 73  | ASN  | HD21 | 7.503      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 73  | ASN  | HD22 | 6.722      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 74  | ARG  | HB2  | 2.244      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 74  | ARG  | HB3  | 1.880      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 74  | ARG  | HD2  | 3.319      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 74  | ARG  | HD3  | 3.276      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 74  | ARG  | HG3  | 1.538      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 75  | GLU  | HB2  | 2.135      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 75  | GLU  | HB3  | 2.083      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 75  | GLU  | HG2  | 2.335      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 78  | LYS  | HB2  | 2.038      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 78  | LYS  | HB3  | 1.851      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 79  | GLU  | HB2  | 2.171      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 79  | GLU  | HG2  | 2.520      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HB2  | 2.157      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HB3  | 1.230      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HD11 | 0.536      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HD12 | 0.536      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HD13 | 0.536      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HD21 | 0.886      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HD22 | 0.886      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | HD23 | 0.886      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 80  | LEU  | CD1  | 26.479     | 0.07        | .         |
| 1       | A     | 80  | LEU  | CD2  | 23.845     | 0.03        | .         |
| 1       | A     | 81  | MET  | HB2  | 2.295      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 81  | MET  | HB3  | 1.732      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 81  | MET  | HG2  | 2.940      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 81  | MET  | HG3  | 2.297      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 82  | LYS  | HB2  | 1.928      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 82  | LYS  | HB3  | 1.836      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | HG11 | 0.860      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | HG12 | 0.860      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | HG13 | 0.860      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | HG21 | 0.976      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | HG22 | 0.976      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | HG23 | 0.976      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | CG1  | 22.878     | 0.03        | .         |
| 1       | A     | 84  | VAL  | CG2  | 23.794     | 0.05        | .         |
| 1       | A     | 85  | ARG  | HB2  | 2.107      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 85  | ARG  | HB3  | 1.886      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 86  | GLU  | HB2  | 2.111      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 86  | GLU  | HG2  | 2.264      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 87  | LEU  | HB2  | 2.428      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 87  | LEU  | HB3  | 1.404      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 87  | LEU  | CD1  | 24.871     | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 88  | LEU  | HB2  | 2.006      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 88  | LEU  | HB3  | 1.348      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 88  | LEU  | CD1  | 26.153     | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 88  | LEU  | CD2  | 22.813     | 0.05        | .         |
| 1       | A     | 89  | GLU  | HB2  | 2.219      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 89  | GLU  | HB3  | 2.107      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 90  | CYS  | HB2  | 3.271      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 90  | CYS  | HB3  | 3.034      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 91  | GLU  | HB2  | 2.415      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 91  | GLU  | HB3  | 2.333      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 91  | GLU  | HG2  | 2.585      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 91  | GLU  | HG3  | 2.433      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 92  | ILE  | HG12 | 1.932      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 92  | ILE  | HG13 | 0.778      | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 93  | GLU  | HB2  | 2.147      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 94  | ASN  | HB2  | 3.000      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 94  | ASN  | HB3  | 2.871      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 94  | ASN  | HD21 | 7.455      | 0.01        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 94  | ASN  | HD22 | 6.457      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 95  | ILE  | HG12 | 1.573      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 95  | ILE  | HG13 | 0.463      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 96  | LEU  | HB2  | 1.837      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 96  | LEU  | HB3  | 1.482      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 96  | LEU  | CD1  | 25.309     | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 96  | LEU  | CD2  | 22.779     | 0.04        | .         |
| 1       | A     | 98  | LYS  | HB2  | 1.600      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 98  | LYS  | HB3  | 1.396      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 98  | LYS  | HD3  | 1.411      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 98  | LYS  | HE3  | 2.793      | 0.03        | .         |
| 1       | A     | 98  | LYS  | HG2  | 0.796      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 98  | LYS  | HG3  | 0.757      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 99  | TYR  | HB2  | 3.035      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 99  | TYR  | HE1  | 6.746      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 100 | PRO  | HB2  | 2.381      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 100 | PRO  | HB3  | 2.003      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 100 | PRO  | HD2  | 3.733      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 100 | PRO  | HD3  | 3.321      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 100 | PRO  | HG2  | 1.999      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 100 | PRO  | HG3  | 1.942      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 101 | GLU  | HB2  | 2.074      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HB2  | 1.961      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HB3  | 1.105      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HD11 | 0.802      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HD12 | 0.802      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HD13 | 0.802      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HD21 | 0.792      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HD22 | 0.792      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | HD23 | 0.792      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | CD1  | 26.766     | 0.03        | .         |
| 1       | A     | 102 | LEU  | CD2  | 23.391     | 0.04        | .         |
| 1       | A     | 103 | ASP  | HB2  | 2.876      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 103 | ASP  | HB3  | 2.566      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 104 | VAL  | HG21 | 1.062      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 104 | VAL  | HG22 | 1.062      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 104 | VAL  | HG23 | 1.062      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 104 | VAL  | CG2  | 21.242     | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 105 | SER  | HB2  | 4.005      | 0.03        | .         |
| 1       | A     | 105 | SER  | HB3  | 3.984      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 106 | LYS  | HB2  | 2.169      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 106 | LYS  | HB3  | 1.844      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 106 | LYS  | HD2  | 1.622      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 106 | LYS  | HG3  | 0.933      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 108 | LYS  | HB2  | 1.850      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 108 | LYS  | HG3  | 0.876      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 109 | GLU  | HB2  | 2.017      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 111 | LEU  | HB2  | 1.955      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 111 | LEU  | HB3  | 1.821      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 111 | LEU  | HD21 | 0.955      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 111 | LEU  | HD22 | 0.955      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 111 | LEU  | HD23 | 0.955      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 111 | LEU  | CD2  | 24.114     | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 113 | LYS  | HB2  | 1.971      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 113 | LYS  | HB3  | 1.888      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 114 | MET  | HB2  | 1.957      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 114 | MET  | HB3  | 1.831      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 114 | MET  | HG2  | 2.520      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 115 | SER  | HB2  | 4.282      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 115 | SER  | HB3  | 4.028      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 116 | TYR  | HB2  | 3.216      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 116 | TYR  | HB3  | 2.980      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 116 | TYR  | HD1  | 7.067      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 116 | TYR  | HE1  | 6.858      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 117 | GLU  | HB2  | 2.085      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 117 | GLU  | HB3  | 1.952      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 118 | GLU  | HB2  | 2.044      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 118 | GLU  | HB3  | 2.210      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 119 | ILE  | HG12 | 1.937      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 119 | ILE  | HG13 | 1.001      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HB2  | 1.656      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HB3  | 1.413      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HD11 | 0.701      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HD12 | 0.701      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HD13 | 0.701      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HD21 | 0.775      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HD22 | 0.775      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | HD23 | 0.775      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | CD1  | 25.020     | 0.08        | .         |
| 1       | A     | 120 | LEU  | CD2  | 22.040     | 0.04        | .         |
| 1       | A     | 121 | LYS  | HB2  | 1.831      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 121 | LYS  | HB3  | 1.751      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 122 | ASN  | HB2  | 2.556      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 122 | ASN  | HB3  | 2.497      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 122 | ASN  | HD21 | 7.863      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 122 | ASN  | HD22 | 7.252      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 124 | ASP  | HB2  | 2.914      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 124 | ASP  | HB3  | 2.689      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 125 | LYS  | HB3  | 1.605      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 125 | LYS  | HG2  | 1.416      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 125 | LYS  | HG3  | 1.212      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 130 | VAL  | HG21 | 0.981      | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 130 | VAL  | HG22 | 0.981      | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 130 | VAL  | HG23 | 0.981      | 0.02        | .         |
| 1       | A     | 130 | VAL  | CG2  | 21.060     | 0.03        | .         |
| 1       | A     | 131 | ASN  | HB2  | 3.057      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 131 | ASN  | HB3  | 2.752      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 132 | LYS  | HB2  | 1.869      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 133 | GLU  | HB2  | 2.083      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 134 | CYS  | HB2  | 3.050      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 134 | CYS  | HB3  | 3.028      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 135 | LEU  | HB2  | 1.718      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 136 | GLU  | HB2  | 2.129      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 137 | LYS  | HB2  | 1.943      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 139 | ARG  | HB2  | 1.995      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 139 | ARG  | HD2  | 3.220      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 140 | GLU  | HB2  | 2.223      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 141 | LYS  | HB2  | 2.042      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | HG11 | 0.984      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | HG12 | 0.984      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | HG13 | 0.984      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | HG21 | 0.803      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | HG22 | 0.803      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | HG23 | 0.803      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | CG1  | 23.840     | 0.03        | .         |
| 1       | A     | 142 | VAL  | CG2  | 21.454     | 0.04        | .         |
| 1       | A     | 143 | LYS  | HB2  | 1.997      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 144 | GLU  | HB2  | 2.119      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 148 | LYS  | HB2  | 1.969      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 149 | TYR  | HB2  | 3.251      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 149 | TYR  | HB3  | 2.834      | 0.01        | .         |
| 1       | A     | 149 | TYR  | HE1  | 6.806      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 150 | LEU  | HB2  | 1.917      | 0.00        | .         |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 150 | LEU  | HB3  | 1.490      | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 150 | LEU  | CD1  | 25.461     | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 150 | LEU  | CD2  | 22.699     | 0.00        | .         |
| 1       | A     | 153 | GLY  | HA2  | 3.946      | 0.00        | .         |

### 7.1.2 Chemical shift referencing ⓘ

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus                | # values | Correction $\pm$ precision, ppm | Suggested action           |
|------------------------|----------|---------------------------------|----------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 151      | $-0.61 \pm 0.07$                | Should be checked          |
| $^{13}\text{C}_\beta$  | 146      | $0.15 \pm 0.04$                 | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}'$       | 150      | $-0.43 \pm 0.05$                | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{15}\text{N}$        | 150      | $-0.04 \pm 0.14$                | None needed ( $< 0.5$ ppm) |

### 7.1.3 Completeness of resonance assignments ⓘ

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 55%, i.e. 1089 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1977. 0 out of 28 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total           | $^1\text{H}$   | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 704/715 (98%)   | 279/288 (97%)  | 284/286 (99%)   | 141/141 (100%)  |
| Sidechain | 385/1226 (31%)  | 147/793 (19%)  | 234/390 (60%)   | 4/43 (9%)       |
| Aromatic  | 0/36 (0%)       | 0/16 (0%)      | 0/20 (0%)       | 0/0 (—%)        |
| Overall   | 1089/1977 (55%) | 426/1097 (39%) | 518/696 (74%)   | 145/184 (79%)   |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 52%, i.e. 1143 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2201. 0 out of 29 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total           | $^1\text{H}$   | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 744/802 (93%)   | 293/324 (90%)  | 301/320 (94%)   | 150/158 (95%)   |
| Sidechain | 399/1306 (31%)  | 151/845 (18%)  | 244/417 (59%)   | 4/44 (9%)       |
| Aromatic  | 0/93 (0%)       | 0/44 (0%)      | 0/37 (0%)       | 0/12 (0%)       |
| Overall   | 1143/2201 (52%) | 444/1213 (37%) | 545/774 (70%)   | 154/214 (72%)   |

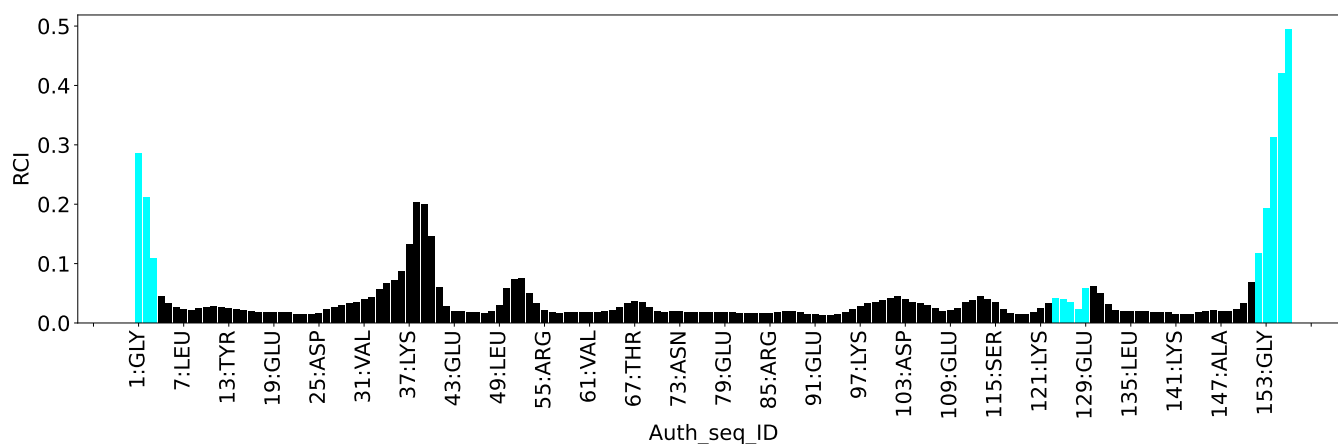
### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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

### 8.1 Conformationally restricting restraints

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

| Description                                              | Value |
|----------------------------------------------------------|-------|
| Total distance restraints                                | 1370  |
| Intra-residue ( $ i-j =0$ )                              | 251   |
| Sequential ( $ i-j =1$ )                                 | 370   |
| Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )                 | 410   |
| Long range ( $ i-j \geq 5$ )                             | 165   |
| Inter-chain                                              | 0     |
| Hydrogen bond restraints                                 | 174   |
| Disulfide bond restraints                                | 0     |
| Total dihedral-angle restraints                          | 272   |
| Number of unmapped restraints                            | 0     |
| Number of restraints per residue                         | 10.3  |
| Number of long range restraints per residue <sup>1</sup> | 1.0   |

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

### 8.2 Residual restraint violations

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

#### 8.2.1 Average number of distance violations per model

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

| Bins (Å)         | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|----------------------------------------|---------|
| 0.1-0.2 (Small)  | 15.5                                   | 0.2     |
| 0.2-0.5 (Medium) | 3.5                                    | 0.46    |
| >0.5 (Large)     | 0.1                                    | 0.78    |

### 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)   | 80.2                                   | 9.91    |
| 10.0-20.0 (Medium) | 0.5                                    | 13.97   |
| >20.0 (Large)      | None                                   | None    |

## 9 Distance violation analysis ⓘ

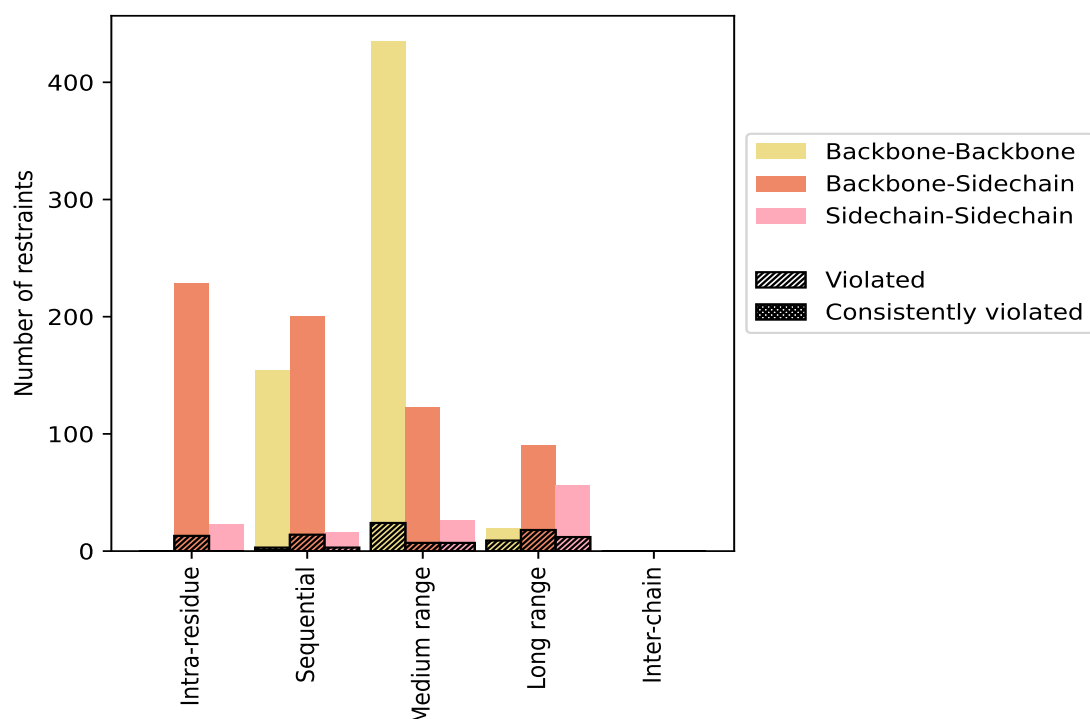
### 9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

| Restraints type                                                             | Count       | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|-----------------------------------------------------------------------------|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|                                                                             |             |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| <b>Intra-residue (<math> i-j =0</math>)</b>                                 | <b>251</b>  | <b>18.3</b>    | <b>13</b>             | <b>5.2</b>     | <b>0.9</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 0           | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 228         | 16.6           | 13                    | 5.7            | 0.9            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 23          | 1.7            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| <b>Sequential (<math> i-j =1</math>)</b>                                    | <b>370</b>  | <b>27.0</b>    | <b>20</b>             | <b>5.4</b>     | <b>1.5</b>     | <b>1</b>                           | <b>0.3</b>     | <b>0.1</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 154         | 11.2           | 3                     | 1.9            | 0.2            | 1                                  | 0.6            | 0.1            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 200         | 14.6           | 14                    | 7.0            | 1.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 16          | 1.2            | 3                     | 18.8           | 0.2            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| <b>Medium range (<math> i-j &gt;1</math> &amp; <math> i-j &lt;5</math>)</b> | <b>410</b>  | <b>29.9</b>    | <b>21</b>             | <b>5.1</b>     | <b>1.5</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 261         | 19.1           | 7                     | 2.7            | 0.5            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 123         | 9.0            | 7                     | 5.7            | 0.5            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 26          | 1.9            | 7                     | 26.9           | 0.5            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| <b>Long range (<math> i-j \geq 5</math>)</b>                                | <b>165</b>  | <b>12.0</b>    | <b>39</b>             | <b>23.6</b>    | <b>2.8</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 19          | 1.4            | 9                     | 47.4           | 0.7            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 90          | 6.6            | 18                    | 20.0           | 1.3            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 56          | 4.1            | 12                    | 21.4           | 0.9            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| <b>Inter-chain</b>                                                          | <b>0</b>    | <b>0.0</b>     | <b>0</b>              | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 0           | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 0           | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 0           | 0.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| <b>Hydrogen bond</b>                                                        | <b>174</b>  | <b>12.7</b>    | <b>17</b>             | <b>9.8</b>     | <b>1.2</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| <b>Disulfide bond</b>                                                       | <b>0</b>    | <b>0.0</b>     | <b>0</b>              | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| <b>Total</b>                                                                | <b>1370</b> | <b>100.0</b>   | <b>110</b>            | <b>8.0</b>     | <b>8.0</b>     | <b>1</b>                           | <b>0.1</b>     | <b>0.1</b>     |
| Backbone-Backbone                                                           | 608         | 44.4           | 36                    | 5.9            | 2.6            | 1                                  | 0.2            | 0.1            |
| Backbone-Sidechain                                                          | 641         | 46.8           | 52                    | 8.1            | 3.8            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Sidechain-Sidechain                                                         | 121         | 8.8            | 22                    | 18.2           | 1.6            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |

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

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



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

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

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

| Model ID | Number of violations |                 |                 |                 |                 |       | Mean (Å) | Max (Å) | SD <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total |          |         |                     |            |
| 1        | 1                    | 5               | 3               | 7               | 0               | 16    | 0.16     | 0.3     | 0.05                | 0.17       |
| 2        | 3                    | 7               | 3               | 4               | 0               | 17    | 0.15     | 0.36    | 0.06                | 0.14       |
| 3        | 2                    | 10              | 4               | 8               | 0               | 24    | 0.16     | 0.36    | 0.06                | 0.14       |
| 4        | 3                    | 6               | 4               | 5               | 0               | 18    | 0.17     | 0.28    | 0.06                | 0.16       |
| 5        | 3                    | 4               | 8               | 4               | 0               | 19    | 0.21     | 0.78    | 0.17                | 0.13       |
| 6        | 4                    | 8               | 5               | 8               | 0               | 25    | 0.18     | 0.29    | 0.05                | 0.16       |
| 7        | 4                    | 7               | 7               | 5               | 0               | 23    | 0.17     | 0.46    | 0.09                | 0.14       |
| 8        | 2                    | 4               | 6               | 9               | 0               | 21    | 0.15     | 0.25    | 0.04                | 0.14       |
| 9        | 1                    | 7               | 9               | 8               | 0               | 25    | 0.15     | 0.24    | 0.03                | 0.15       |
| 10       | 2                    | 5               | 4               | 6               | 0               | 17    | 0.15     | 0.24    | 0.04                | 0.14       |

*Continued on next page...*

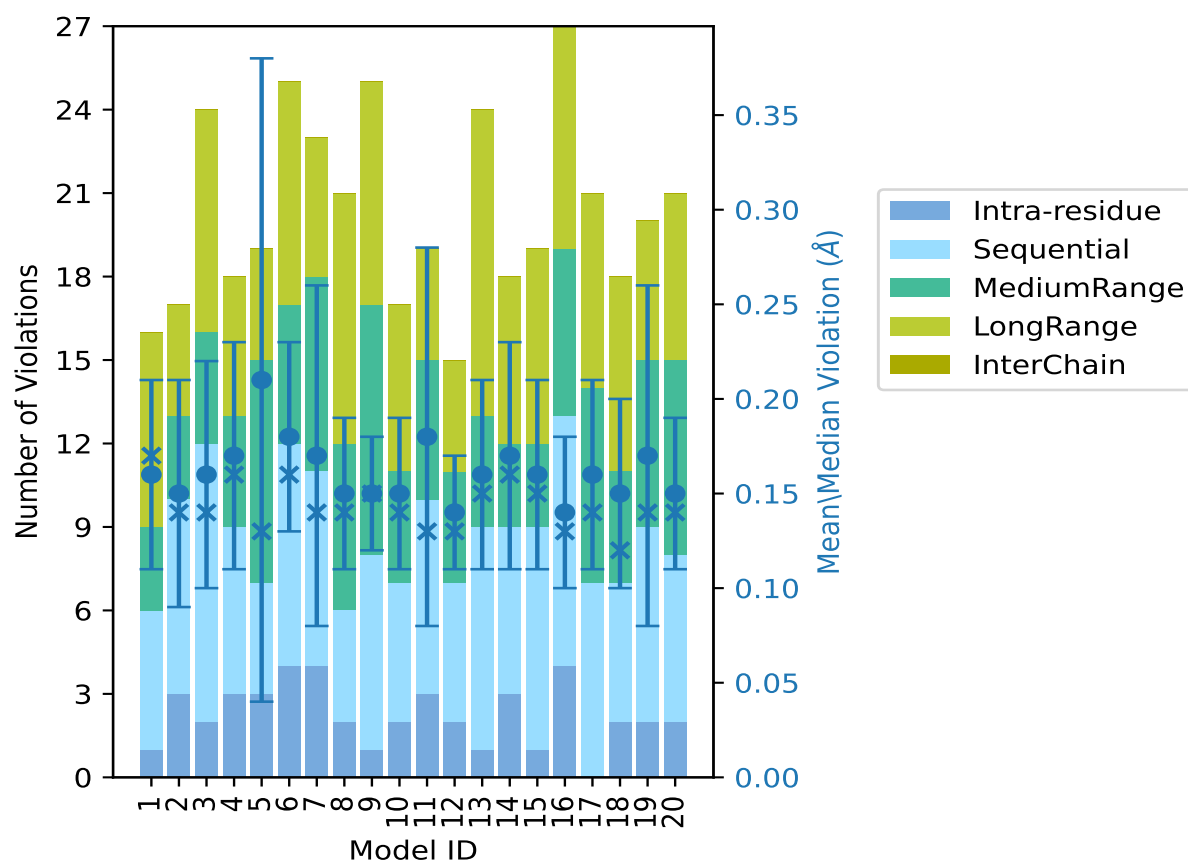
Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations |                 |                 |                 |                 |       | Mean (Å) | Max (Å) | SD <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total |          |         |                     |            |
| 11       | 3                    | 7               | 5               | 4               | 0               | 19    | 0.18     | 0.45    | 0.1                 | 0.13       |
| 12       | 2                    | 5               | 4               | 4               | 0               | 15    | 0.14     | 0.2     | 0.03                | 0.13       |
| 13       | 1                    | 8               | 4               | 11              | 0               | 24    | 0.16     | 0.3     | 0.05                | 0.15       |
| 14       | 3                    | 6               | 3               | 6               | 0               | 18    | 0.17     | 0.3     | 0.06                | 0.16       |
| 15       | 1                    | 8               | 3               | 7               | 0               | 19    | 0.16     | 0.32    | 0.05                | 0.15       |
| 16       | 4                    | 9               | 6               | 8               | 0               | 27    | 0.14     | 0.28    | 0.04                | 0.13       |
| 17       | 0                    | 7               | 7               | 7               | 0               | 21    | 0.16     | 0.27    | 0.05                | 0.14       |
| 18       | 2                    | 5               | 4               | 7               | 0               | 18    | 0.15     | 0.27    | 0.05                | 0.12       |
| 19       | 2                    | 7               | 6               | 5               | 0               | 20    | 0.17     | 0.52    | 0.09                | 0.14       |
| 20       | 2                    | 6               | 7               | 6               | 0               | 21    | 0.15     | 0.26    | 0.04                | 0.14       |

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>Standard deviation

### 9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model ⓘ



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

### 9.3 Distance violation statistics for the ensemble

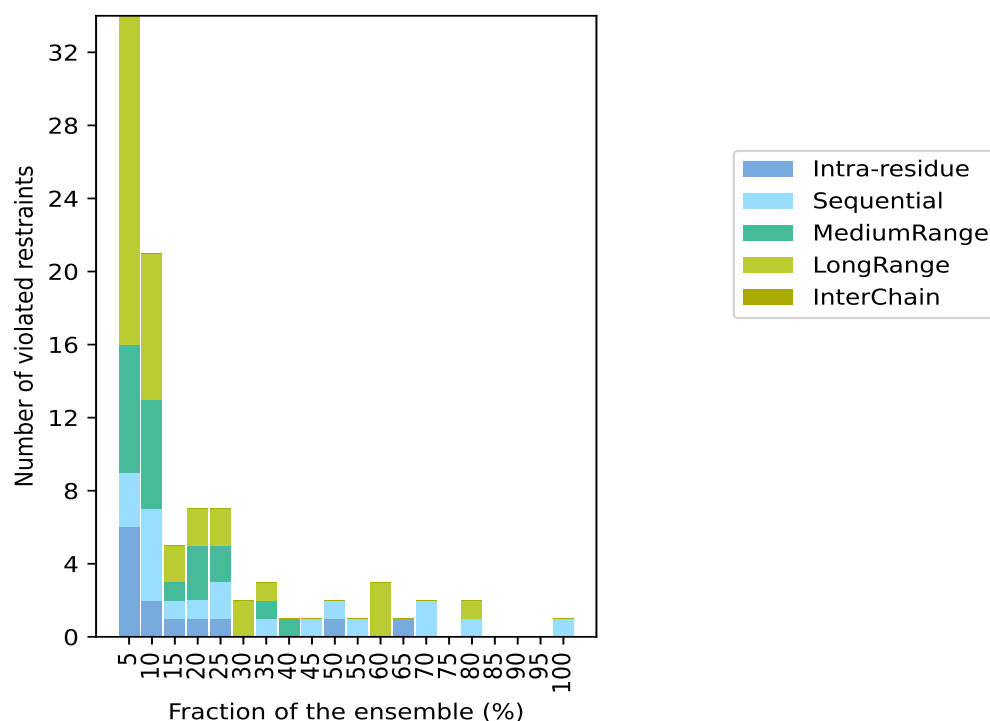
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1103(IR:238, SQ:350, MR:389, LR:126, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints |                 |                 |                 |                 |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR <sup>1</sup>               | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total | Count <sup>6</sup>       | %     |
| 6                             | 3               | 7               | 18              | 0               | 34    | 1                        | 5.0   |
| 2                             | 5               | 6               | 8               | 0               | 21    | 2                        | 10.0  |
| 1                             | 1               | 1               | 2               | 0               | 5     | 3                        | 15.0  |
| 1                             | 1               | 3               | 2               | 0               | 7     | 4                        | 20.0  |
| 1                             | 2               | 2               | 2               | 0               | 7     | 5                        | 25.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 2               | 0               | 2     | 6                        | 30.0  |
| 0                             | 1               | 1               | 1               | 0               | 3     | 7                        | 35.0  |
| 0                             | 0               | 1               | 0               | 0               | 1     | 8                        | 40.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 1     | 9                        | 45.0  |
| 1                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 2     | 10                       | 50.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 1     | 11                       | 55.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 3               | 0               | 3     | 12                       | 60.0  |
| 1                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 1     | 13                       | 65.0  |
| 0                             | 2               | 0               | 0               | 0               | 2     | 14                       | 70.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 15                       | 75.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 1               | 0               | 2     | 16                       | 80.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 17                       | 85.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 18                       | 90.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 19                       | 95.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 1     | 20                       | 100.0 |

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup> Number of models with violations

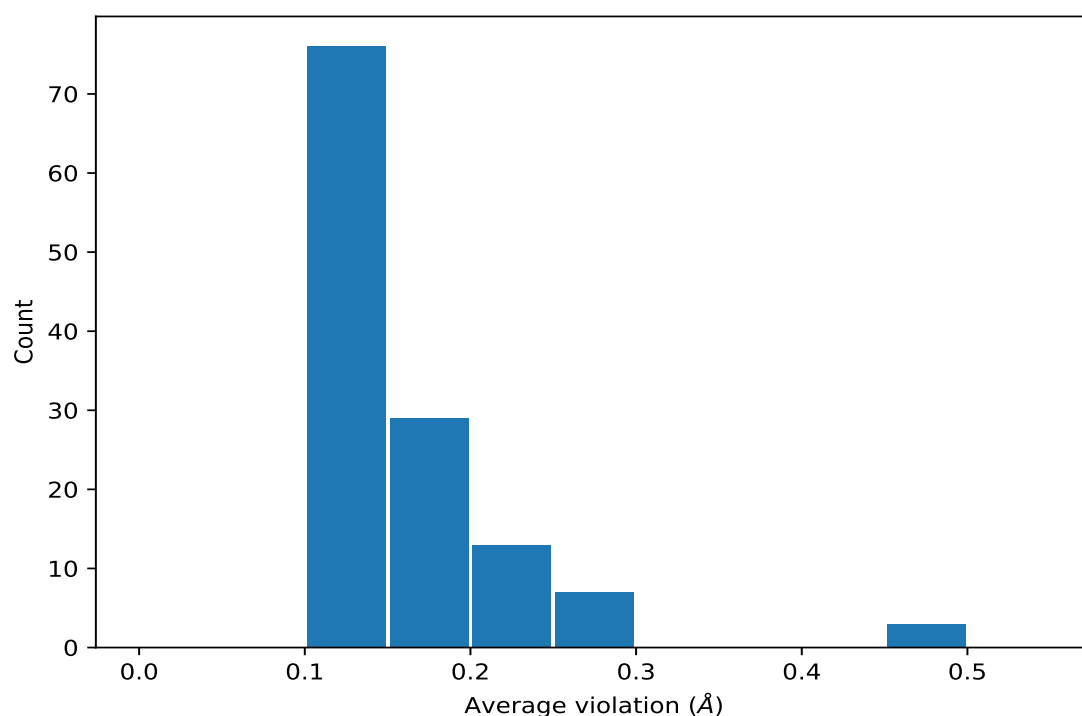
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 20                  | 0.21     | 0.05                | 0.24       |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 16                  | 0.18     | 0.09                | 0.15       |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 16                  | 0.16     | 0.05                | 0.14       |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 16                  | 0.16     | 0.05                | 0.14       |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 16                  | 0.16     | 0.05                | 0.14       |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 14                  | 0.15     | 0.04                | 0.15       |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 14                  | 0.15     | 0.04                | 0.15       |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 14                  | 0.15     | 0.04                | 0.15       |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 14                  | 0.15     | 0.04                | 0.14       |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 14                  | 0.15     | 0.04                | 0.14       |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 14                  | 0.15     | 0.04                | 0.14       |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 13                  | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 12                  | 0.16     | 0.03                | 0.15       |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 12                  | 0.16     | 0.03                | 0.15       |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 12                  | 0.16     | 0.03                | 0.15       |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 12                  | 0.15     | 0.04                | 0.15       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 12                  | 0.15     | 0.04                | 0.15       |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 12                  | 0.15     | 0.04                | 0.15       |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 12                  | 0.13     | 0.02                | 0.13       |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 11                  | 0.15     | 0.04                | 0.13       |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 10                  | 0.27     | 0.07                | 0.28       |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 10                  | 0.2      | 0.04                | 0.21       |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 9                   | 0.22     | 0.03                | 0.22       |
| (2,862)  | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 8                   | 0.15     | 0.03                | 0.16       |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 7                   | 0.25     | 0.23                | 0.15       |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 7                   | 0.25     | 0.23                | 0.15       |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 7                   | 0.25     | 0.23                | 0.15       |
| (2,228)  | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 7                   | 0.14     | 0.02                | 0.14       |
| (2,958)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 7                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,84)   | 1:62:A:ALA:O    | 1:66:A:GLU:H     | 7                   | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD11  | 6                   | 0.23     | 0.08                | 0.2        |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD12  | 6                   | 0.23     | 0.08                | 0.2        |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD13  | 6                   | 0.23     | 0.08                | 0.2        |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB1  | 6                   | 0.14     | 0.04                | 0.14       |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB2  | 6                   | 0.14     | 0.04                | 0.14       |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB3  | 6                   | 0.14     | 0.04                | 0.14       |
| (1,66)   | 1:45:A:VAL:O    | 1:49:A:LEU:H     | 6                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (2,1187) | 1:11:A:LEU:CD1  | 1:106:A:LYS:CG   | 5                   | 0.21     | 0.07                | 0.19       |
| (2,1080) | 1:121:A:LYS:H   | 1:122:A:ASN:HD21 | 5                   | 0.17     | 0.04                | 0.17       |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:H     | 5                   | 0.15     | 0.03                | 0.14       |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:H     | 5                   | 0.15     | 0.03                | 0.14       |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:H     | 5                   | 0.15     | 0.03                | 0.14       |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD21 | 5                   | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD22 | 5                   | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD23 | 5                   | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (2,919)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:43:A:GLU:H     | 5                   | 0.13     | 0.03                | 0.12       |
| (2,906)  | 1:98:A:LYS:H    | 1:99:A:TYR:HE1   | 5                   | 0.13     | 0.03                | 0.11       |
| (2,170)  | 1:11:A:LEU:HD11 | 1:103:A:ASP:H    | 5                   | 0.13     | 0.02                | 0.14       |
| (2,170)  | 1:11:A:LEU:HD12 | 1:103:A:ASP:H    | 5                   | 0.13     | 0.02                | 0.14       |
| (2,170)  | 1:11:A:LEU:HD13 | 1:103:A:ASP:H    | 5                   | 0.13     | 0.02                | 0.14       |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD11 | 4                   | 0.18     | 0.02                | 0.18       |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD12 | 4                   | 0.18     | 0.02                | 0.18       |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD13 | 4                   | 0.18     | 0.02                | 0.18       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG21 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG22 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG23 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG21 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG22 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG23 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG21 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG22 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG23 | 4                   | 0.16     | 0.05                | 0.16       |
| (2,1149) | 1:40:A:GLY:H    | 1:68:A:GLY:HA2   | 4                   | 0.15     | 0.05                | 0.15       |
| (2,421)  | 1:99:A:TYR:H    | 1:100:A:PRO:HB3  | 4                   | 0.14     | 0.02                | 0.15       |
| (2,373)  | 1:94:A:ASN:HA   | 1:130:A:VAL:HB   | 4                   | 0.13     | 0.02                | 0.12       |
| (2,828)  | 1:88:A:LEU:HG   | 1:90:A:CYS:H     | 4                   | 0.13     | 0.02                | 0.12       |
| (2,475)  | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:H     | 4                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,134)  | 1:104:A:VAL:O   | 1:108:A:LYS:H    | 4                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,56)   | 1:29:A:ALA:O    | 1:33:A:ALA:H     | 4                   | 0.11     | 0.01                | 0.11       |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD11  | 3                   | 0.48     | 0.03                | 0.46       |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD12  | 3                   | 0.48     | 0.03                | 0.46       |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD13  | 3                   | 0.48     | 0.03                | 0.46       |
| (2,1065) | 1:36:A:THR:H    | 1:71:A:GLU:H     | 3                   | 0.16     | 0.05                | 0.14       |
| (2,1194) | 1:11:A:LEU:CB   | 1:106:A:LYS:CG   | 3                   | 0.15     | 0.01                | 0.16       |
| (1,68)   | 1:46:A:LYS:O    | 1:50:A:GLU:H     | 3                   | 0.15     | 0.0                 | 0.15       |
| (2,319)  | 1:149:A:TYR:HE1 | 1:150:A:LEU:HA   | 3                   | 0.14     | 0.0                 | 0.14       |
| (2,644)  | 1:8:A:GLU:HA    | 1:11:A:LEU:H     | 3                   | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,48)   | 1:25:A:ASP:O    | 1:29:A:ALA:H     | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG21 | 2                   | 0.26     | 0.04                | 0.26       |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG22 | 2                   | 0.26     | 0.04                | 0.26       |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG23 | 2                   | 0.26     | 0.04                | 0.26       |
| (2,336)  | 1:14:A:LEU:HA   | 1:92:A:ILE:HA    | 2                   | 0.24     | 0.08                | 0.24       |
| (2,1193) | 1:35:A:VAL:CG1  | 1:71:A:GLU:CG    | 2                   | 0.23     | 0.05                | 0.23       |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG21 | 2                   | 0.22     | 0.08                | 0.22       |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG22 | 2                   | 0.22     | 0.08                | 0.22       |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG23 | 2                   | 0.22     | 0.08                | 0.22       |
| (2,265)  | 1:9:A:ALA:HA    | 1:122:A:ASN:HB3  | 2                   | 0.2      | 0.02                | 0.2        |
| (2,333)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:104:A:VAL:HA   | 2                   | 0.18     | 0.02                | 0.18       |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD11  | 2                   | 0.18     | 0.06                | 0.18       |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD12  | 2                   | 0.18     | 0.06                | 0.18       |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD13  | 2                   | 0.18     | 0.06                | 0.18       |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG21  | 2                   | 0.16     | 0.06                | 0.16       |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG22  | 2                   | 0.16     | 0.06                | 0.16       |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG23  | 2                   | 0.16     | 0.06                | 0.16       |
| (2,773)  | 1:77:A:ALA:HA   | 1:149:A:TYR:H    | 2                   | 0.16     | 0.02                | 0.16       |
| (2,192)  | 1:62:A:ALA:HB1  | 1:63:A:GLN:HG3   | 2                   | 0.15     | 0.03                | 0.15       |
| (2,192)  | 1:62:A:ALA:HB2  | 1:63:A:GLN:HG3   | 2                   | 0.15     | 0.03                | 0.15       |
| (2,192)  | 1:62:A:ALA:HB3  | 1:63:A:GLN:HG3   | 2                   | 0.15     | 0.03                | 0.15       |
| (2,874)  | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD21  | 2                   | 0.15     | 0.03                | 0.15       |
| (2,874)  | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD22  | 2                   | 0.15     | 0.03                | 0.15       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

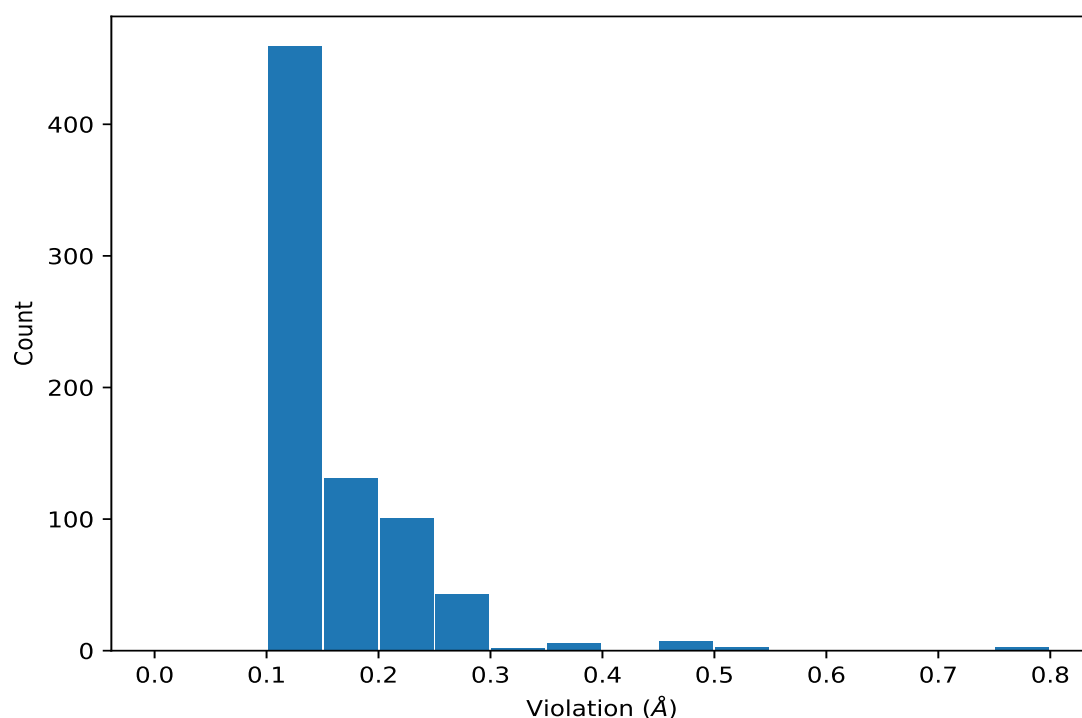
| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,874)  | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD23  | 2                   | 0.15     | 0.03                | 0.15       |
| (2,689)  | 1:2:A:SER:H     | 1:5:A:LYS:H      | 2                   | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB1  | 1:119:A:ILE:HA   | 2                   | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB2  | 1:119:A:ILE:HA   | 2                   | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB3  | 1:119:A:ILE:HA   | 2                   | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (2,480)  | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:HB2   | 2                   | 0.14     | 0.02                | 0.14       |
| (1,54)   | 1:28:A:LEU:O    | 1:32:A:ASP:H     | 2                   | 0.13     | 0.02                | 0.13       |
| (1,60)   | 1:42:A:LYS:O    | 1:46:A:LYS:H     | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,278)  | 1:115:A:SER:HA  | 1:116:A:TYR:HB2  | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB1   | 1:124:A:ASP:H    | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB2   | 1:124:A:ASP:H    | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB3   | 1:124:A:ASP:H    | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (1,120)  | 1:90:A:CYS:O    | 1:94:A:ASN:H     | 2                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,142)  | 1:109:A:GLU:O   | 1:113:A:LYS:H    | 2                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (2,125)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD21 | 2                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (2,125)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD22 | 2                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (2,125)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD23 | 2                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:HD21  | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:HD21  | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:HD21  | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD11  | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD12  | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD13  | 2                   | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (2,1196) | 1:74:A:ARG:CG   | 1:75:A:GLU:CB    | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,82)   | 1:61:A:VAL:O    | 1:65:A:ALA:H     | 2                   | 0.11     | 0.01                | 0.11       |
| (2,120)  | 1:75:A:GLU:HB3  | 1:76:A:ALA:HB1   | 2                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (2,120)  | 1:75:A:GLU:HB3  | 1:76:A:ALA:HB2   | 2                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (2,120)  | 1:75:A:GLU:HB3  | 1:76:A:ALA:HB3   | 2                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |

<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>Standard deviation

## 9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 5        | 0.78          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 5        | 0.78          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 5        | 0.78          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD11  | 19       | 0.52          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD12  | 19       | 0.52          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD13  | 19       | 0.52          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 5        | 0.46          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD11  | 7        | 0.46          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD12  | 7        | 0.46          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD13  | 7        | 0.46          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD11  | 11       | 0.45          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD12  | 11       | 0.45          |
| (2,172)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:11:A:LEU:HD13  | 11       | 0.45          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD11  | 11       | 0.39          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD12  | 11       | 0.39          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD13  | 11       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 2        | 0.36          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 3        | 0.36          |
| (2,282)  | 1:116:A:TYR:HA  | 1:116:A:TYR:HE1  | 5        | 0.36          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 7        | 0.33          |
| (2,336)  | 1:14:A:LEU:HA   | 1:92:A:ILE:HA    | 15       | 0.32          |
| (2,1187) | 1:11:A:LEU:CD1  | 1:106:A:LYS:CG   | 1        | 0.3           |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG21 | 13       | 0.3           |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG22 | 13       | 0.3           |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG23 | 13       | 0.3           |
| (2,1150) | 1:39:A:GLU:HA   | 1:40:A:GLY:H     | 11       | 0.3           |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 14       | 0.3           |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 14       | 0.3           |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 14       | 0.3           |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG21 | 5        | 0.3           |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG22 | 5        | 0.3           |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG23 | 5        | 0.3           |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 6        | 0.29          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 7        | 0.29          |
| (2,1193) | 1:35:A:VAL:CG1  | 1:71:A:GLU:CG    | 4        | 0.28          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 7        | 0.28          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 14       | 0.28          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 16       | 0.28          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 6        | 0.27          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 7        | 0.27          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 17       | 0.27          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 18       | 0.27          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 18       | 0.27          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 18       | 0.27          |
| (2,1187) | 1:11:A:LEU:CD1  | 1:106:A:LYS:CG   | 20       | 0.26          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 14       | 0.26          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 14       | 0.26          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 14       | 0.26          |
| (2,708)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:91:A:GLU:HG2   | 4        | 0.26          |
| (2,3)    | 1:17:A:LEU:HB2  | 1:92:A:ILE:HD11  | 19       | 0.26          |
| (2,3)    | 1:17:A:LEU:HB2  | 1:92:A:ILE:HD12  | 19       | 0.26          |
| (2,3)    | 1:17:A:LEU:HB2  | 1:92:A:ILE:HD13  | 19       | 0.26          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD11  | 3        | 0.26          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD12  | 3        | 0.26          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD13  | 3        | 0.26          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 8        | 0.25          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 15       | 0.25          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 17       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 19       | 0.25          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 4        | 0.25          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 15       | 0.25          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 17       | 0.25          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 17       | 0.25          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 17       | 0.25          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 9        | 0.24          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 10       | 0.24          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 13       | 0.24          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 18       | 0.24          |
| (2,1080) | 1:121:A:LYS:H   | 1:122:A:ASN:HD21 | 6        | 0.24          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 3        | 0.24          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 4        | 0.24          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 6        | 0.24          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 3        | 0.24          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 3        | 0.24          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 3        | 0.24          |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD11  | 4        | 0.24          |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD12  | 4        | 0.24          |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD13  | 4        | 0.24          |
| (2,1191) | 1:96:A:LEU:CB   | 1:102:A:LEU:CD1  | 6        | 0.23          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 20       | 0.23          |
| (2,1065) | 1:36:A:THR:H    | 1:71:A:GLU:H     | 11       | 0.23          |
| (2,1005) | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:75:A:GLU:H     | 11       | 0.23          |
| (2,1005) | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:75:A:GLU:H     | 11       | 0.23          |
| (2,1005) | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:75:A:GLU:H     | 11       | 0.23          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 6        | 0.23          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 13       | 0.23          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 6        | 0.23          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 6        | 0.23          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 6        | 0.23          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 1        | 0.22          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 5        | 0.22          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 9        | 0.22          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 13       | 0.22          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 3        | 0.22          |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG21  | 6        | 0.22          |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG22  | 6        | 0.22          |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG23  | 6        | 0.22          |
| (2,252)  | 1:37:A:LYS:HA   | 1:70:A:THR:HG21  | 11       | 0.22          |
| (2,252)  | 1:37:A:LYS:HA   | 1:70:A:THR:HG22  | 11       | 0.22          |
| (2,252)  | 1:37:A:LYS:HA   | 1:70:A:THR:HG23  | 11       | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG21 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG22 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG23 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG21 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG22 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG23 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG21 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG22 | 3        | 0.22          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG23 | 3        | 0.22          |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG21 | 16       | 0.22          |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG22 | 16       | 0.22          |
| (2,56)   | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:119:A:ILE:HG23 | 16       | 0.22          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:H     | 8        | 0.21          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:H     | 8        | 0.21          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:H     | 8        | 0.21          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 14       | 0.21          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 17       | 0.21          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 10       | 0.21          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 18       | 0.21          |
| (2,272)  | 1:151:A:ALA:HA  | 1:154:A:THR:HG21 | 20       | 0.21          |
| (2,272)  | 1:151:A:ALA:HA  | 1:154:A:THR:HG22 | 20       | 0.21          |
| (2,272)  | 1:151:A:ALA:HA  | 1:154:A:THR:HG23 | 20       | 0.21          |
| (2,265)  | 1:9:A:ALA:HA    | 1:122:A:ASN:HB3  | 13       | 0.21          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 8        | 0.21          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 8        | 0.21          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 8        | 0.21          |
| (2,1149) | 1:40:A:GLY:H    | 1:68:A:GLY:HA2   | 2        | 0.2           |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 1        | 0.2           |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 11       | 0.2           |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 12       | 0.2           |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 14       | 0.2           |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 10       | 0.2           |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 10       | 0.2           |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 10       | 0.2           |
| (2,333)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:104:A:VAL:HA   | 16       | 0.2           |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 2        | 0.2           |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 2        | 0.2           |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 2        | 0.2           |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 13       | 0.2           |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 13       | 0.2           |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 13       | 0.2           |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD11 | 16       | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD12 | 16       | 0.2           |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD13 | 16       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG21 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG22 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG23 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG21 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG22 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG23 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG21 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG22 | 18       | 0.2           |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG23 | 18       | 0.2           |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 4        | 0.2           |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 4        | 0.2           |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 4        | 0.2           |
| (2,87)   | 1:48:A:ILE:HA   | 1:48:A:ILE:HD11  | 16       | 0.2           |
| (2,87)   | 1:48:A:ILE:HA   | 1:48:A:ILE:HD12  | 16       | 0.2           |
| (2,87)   | 1:48:A:ILE:HA   | 1:48:A:ILE:HD13  | 16       | 0.2           |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD11  | 6        | 0.2           |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD12  | 6        | 0.2           |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD13  | 6        | 0.2           |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD11  | 18       | 0.2           |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD12  | 18       | 0.2           |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD13  | 18       | 0.2           |
| (2,1187) | 1:11:A:LEU:CD1  | 1:106:A:LYS:CG   | 5        | 0.19          |
| (2,1187) | 1:11:A:LEU:CD1  | 1:106:A:LYS:CG   | 13       | 0.19          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 1        | 0.19          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 14       | 0.19          |
| (2,1149) | 1:40:A:GLY:H    | 1:68:A:GLY:HA2   | 15       | 0.19          |
| (2,1080) | 1:121:A:LYS:H   | 1:122:A:ASN:HD21 | 7        | 0.19          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 19       | 0.19          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 19       | 0.19          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 19       | 0.19          |
| (2,862)  | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 8        | 0.19          |
| (2,862)  | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 11       | 0.19          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 1        | 0.19          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 12       | 0.19          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 12       | 0.19          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 12       | 0.19          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB1  | 19       | 0.19          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB2  | 19       | 0.19          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB3  | 19       | 0.19          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 1        | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 1        | 0.19          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 1        | 0.19          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 14       | 0.19          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 14       | 0.19          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 14       | 0.19          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD11  | 1        | 0.19          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD12  | 1        | 0.19          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD13  | 1        | 0.19          |
| (2,1193) | 1:35:A:VAL:CG1  | 1:71:A:GLU:CG    | 13       | 0.18          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 9        | 0.18          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 6        | 0.18          |
| (2,919)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:43:A:GLU:H     | 18       | 0.18          |
| (2,906)  | 1:98:A:LYS:H    | 1:99:A:TYR:HE1   | 1        | 0.18          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 17       | 0.18          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 17       | 0.18          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 17       | 0.18          |
| (2,773)  | 1:77:A:ALA:HA   | 1:149:A:TYR:H    | 14       | 0.18          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 15       | 0.18          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 10       | 0.18          |
| (2,265)  | 1:9:A:ALA:HA    | 1:122:A:ASN:HB3  | 8        | 0.18          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 9        | 0.18          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 9        | 0.18          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 9        | 0.18          |
| (2,205)  | 1:27:A:ALA:HB1  | 1:31:A:VAL:HB    | 11       | 0.18          |
| (2,205)  | 1:27:A:ALA:HB2  | 1:31:A:VAL:HB    | 11       | 0.18          |
| (2,205)  | 1:27:A:ALA:HB3  | 1:31:A:VAL:HB    | 11       | 0.18          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD11 | 2        | 0.18          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD12 | 2        | 0.18          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD13 | 2        | 0.18          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD11 | 18       | 0.18          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD12 | 18       | 0.18          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD13 | 18       | 0.18          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 15       | 0.18          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 15       | 0.18          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 15       | 0.18          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 10       | 0.18          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 10       | 0.18          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 10       | 0.18          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 13       | 0.18          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 13       | 0.18          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 13       | 0.18          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 3        | 0.17          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 16       | 0.17          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 8        | 0.17          |
| (2,1080) | 1:121:A:LYS:H   | 1:122:A:ASN:HD21 | 14       | 0.17          |
| (2,1027) | 1:90:A:CYS:HA   | 1:93:A:GLU:H     | 6        | 0.17          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 9        | 0.17          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 9        | 0.17          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 9        | 0.17          |
| (2,874)  | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD21  | 20       | 0.17          |
| (2,874)  | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD22  | 20       | 0.17          |
| (2,874)  | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD23  | 20       | 0.17          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 16       | 0.17          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 4        | 0.17          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 4        | 0.17          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 4        | 0.17          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB1  | 8        | 0.17          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB2  | 8        | 0.17          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB3  | 8        | 0.17          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB1  | 17       | 0.17          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB2  | 17       | 0.17          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB3  | 17       | 0.17          |
| (2,384)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:70:A:THR:HG21  | 20       | 0.17          |
| (2,384)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:70:A:THR:HG22  | 20       | 0.17          |
| (2,384)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:70:A:THR:HG23  | 20       | 0.17          |
| (2,333)  | 1:11:A:LEU:HA   | 1:104:A:VAL:HA   | 12       | 0.17          |
| (2,192)  | 1:62:A:ALA:HB1  | 1:63:A:GLN:HG3   | 4        | 0.17          |
| (2,192)  | 1:62:A:ALA:HB2  | 1:63:A:GLN:HG3   | 4        | 0.17          |
| (2,192)  | 1:62:A:ALA:HB3  | 1:63:A:GLN:HG3   | 4        | 0.17          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 4        | 0.17          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 4        | 0.17          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 4        | 0.17          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 6        | 0.17          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 6        | 0.17          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 6        | 0.17          |
| (2,39)   | 1:35:A:VAL:HG21 | 1:71:A:GLU:HA    | 19       | 0.17          |
| (2,39)   | 1:35:A:VAL:HG22 | 1:71:A:GLU:HA    | 19       | 0.17          |
| (2,39)   | 1:35:A:VAL:HG23 | 1:71:A:GLU:HA    | 19       | 0.17          |
| (2,1194) | 1:11:A:LEU:CB   | 1:106:A:LYS:CG   | 7        | 0.16          |
| (2,1194) | 1:11:A:LEU:CB   | 1:106:A:LYS:CG   | 10       | 0.16          |
| (2,1003) | 1:114:A:MET:HB2 | 1:115:A:SER:H    | 19       | 0.16          |
| (2,906)  | 1:98:A:LYS:H    | 1:99:A:TYR:HE1   | 3        | 0.16          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 20       | 0.16          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 20       | 0.16          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 20       | 0.16          |
| (2,862)  | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 4        | 0.16          |
| (2,862)  | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 17       | 0.16          |
| (2,828)  | 1:88:A:LEU:HG   | 1:90:A:CYS:H     | 3        | 0.16          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 9        | 0.16          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 6        | 0.16          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 20       | 0.16          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 20       | 0.16          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 20       | 0.16          |
| (2,421)  | 1:99:A:TYR:H    | 1:100:A:PRO:HB3  | 9        | 0.16          |
| (2,421)  | 1:99:A:TYR:H    | 1:100:A:PRO:HB3  | 16       | 0.16          |
| (2,336)  | 1:14:A:LEU:HA   | 1:92:A:ILE:HA    | 19       | 0.16          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 8        | 0.16          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 8        | 0.16          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 8        | 0.16          |
| (2,228)  | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 1        | 0.16          |
| (2,197)  | 1:114:A:MET:HB3 | 1:119:A:ILE:HD11 | 9        | 0.16          |
| (2,197)  | 1:114:A:MET:HB3 | 1:119:A:ILE:HD12 | 9        | 0.16          |
| (2,197)  | 1:114:A:MET:HB3 | 1:119:A:ILE:HD13 | 9        | 0.16          |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD21 | 10       | 0.16          |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD22 | 10       | 0.16          |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD23 | 10       | 0.16          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 7        | 0.16          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 7        | 0.16          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 7        | 0.16          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD11  | 16       | 0.16          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD12  | 16       | 0.16          |
| (2,1)    | 1:14:A:LEU:H    | 1:92:A:ILE:HD13  | 16       | 0.16          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 2        | 0.15          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 5        | 0.15          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 15       | 0.15          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:H     | 7        | 0.15          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:H     | 7        | 0.15          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:H     | 7        | 0.15          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 15       | 0.15          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 19       | 0.15          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 2        | 0.15          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 2        | 0.15          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 2        | 0.15          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 15       | 0.15          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 15       | 0.15          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 15       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,862) | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 10       | 0.15          |
| (2,771) | 1:76:A:ALA:HA   | 1:149:A:TYR:H    | 2        | 0.15          |
| (2,689) | 1:2:A:SER:H     | 1:5:A:LYS:H      | 17       | 0.15          |
| (2,524) | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 6        | 0.15          |
| (2,480) | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:HB2   | 9        | 0.15          |
| (2,373) | 1:94:A:ASN:HA   | 1:130:A:VAL:HB   | 7        | 0.15          |
| (2,228) | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 9        | 0.15          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD11 | 1:103:A:ASP:H    | 9        | 0.15          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD12 | 1:103:A:ASP:H    | 9        | 0.15          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD13 | 1:103:A:ASP:H    | 9        | 0.15          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD11 | 1:103:A:ASP:H    | 17       | 0.15          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD12 | 1:103:A:ASP:H    | 17       | 0.15          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD13 | 1:103:A:ASP:H    | 17       | 0.15          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 9        | 0.15          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 9        | 0.15          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 9        | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 3        | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 3        | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 3        | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 13       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 13       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 13       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 15       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 15       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 15       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 20       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 20       | 0.15          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 20       | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD21 | 7        | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD22 | 7        | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD23 | 7        | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD21 | 8        | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD22 | 8        | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD23 | 8        | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD21 | 13       | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD22 | 13       | 0.15          |
| (2,126) | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD23 | 13       | 0.15          |
| (2,62)  | 1:12:A:ALA:HB1  | 1:119:A:ILE:HG21 | 13       | 0.15          |
| (2,62)  | 1:12:A:ALA:HB1  | 1:119:A:ILE:HG22 | 13       | 0.15          |
| (2,62)  | 1:12:A:ALA:HB1  | 1:119:A:ILE:HG23 | 13       | 0.15          |
| (2,62)  | 1:12:A:ALA:HB2  | 1:119:A:ILE:HG21 | 13       | 0.15          |
| (2,62)  | 1:12:A:ALA:HB2  | 1:119:A:ILE:HG22 | 13       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,62)   | 1:12:A:ALA:HB2  | 1:119:A:ILE:HG23 | 13       | 0.15          |
| (2,62)   | 1:12:A:ALA:HB3  | 1:119:A:ILE:HG21 | 13       | 0.15          |
| (2,62)   | 1:12:A:ALA:HB3  | 1:119:A:ILE:HG22 | 13       | 0.15          |
| (2,62)   | 1:12:A:ALA:HB3  | 1:119:A:ILE:HG23 | 13       | 0.15          |
| (1,84)   | 1:62:A:ALA:O    | 1:66:A:GLU:H     | 8        | 0.15          |
| (1,68)   | 1:46:A:LYS:O    | 1:50:A:GLU:H     | 9        | 0.15          |
| (1,68)   | 1:46:A:LYS:O    | 1:50:A:GLU:H     | 14       | 0.15          |
| (1,54)   | 1:28:A:LEU:O    | 1:32:A:ASP:H     | 20       | 0.15          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 4        | 0.14          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 3        | 0.14          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 14       | 0.14          |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG21 | 8        | 0.14          |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG22 | 8        | 0.14          |
| (2,1152) | 1:40:A:GLY:H    | 1:154:A:THR:HG23 | 8        | 0.14          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:H     | 19       | 0.14          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:H     | 19       | 0.14          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:H     | 19       | 0.14          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 2        | 0.14          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 13       | 0.14          |
| (2,1080) | 1:121:A:LYS:H   | 1:122:A:ASN:HD21 | 20       | 0.14          |
| (2,1065) | 1:36:A:THR:H    | 1:71:A:GLU:H     | 6        | 0.14          |
| (2,958)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 9        | 0.14          |
| (2,958)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 12       | 0.14          |
| (2,919)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:43:A:GLU:H     | 7        | 0.14          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 7        | 0.14          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 7        | 0.14          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 7        | 0.14          |
| (2,773)  | 1:77:A:ALA:HA   | 1:149:A:TYR:H    | 15       | 0.14          |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB1   | 1:124:A:ASP:H    | 8        | 0.14          |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB2   | 1:124:A:ASP:H    | 8        | 0.14          |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB3   | 1:124:A:ASP:H    | 8        | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 2        | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 2        | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 2        | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 13       | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 13       | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 13       | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 16       | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 16       | 0.14          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 16       | 0.14          |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 2        | 0.14          |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 12       | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,475)  | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:H     | 3        | 0.14          |
| (2,373)  | 1:94:A:ASN:HA   | 1:130:A:VAL:HB   | 17       | 0.14          |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB1  | 1:119:A:ILE:HA   | 6        | 0.14          |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB2  | 1:119:A:ILE:HA   | 6        | 0.14          |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB3  | 1:119:A:ILE:HA   | 6        | 0.14          |
| (2,319)  | 1:149:A:TYR:HE1 | 1:150:A:LEU:HA   | 13       | 0.14          |
| (2,319)  | 1:149:A:TYR:HE1 | 1:150:A:LEU:HA   | 16       | 0.14          |
| (2,278)  | 1:115:A:SER:HA  | 1:116:A:TYR:HB2  | 15       | 0.14          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 3        | 0.14          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 3        | 0.14          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 3        | 0.14          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 10       | 0.14          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 10       | 0.14          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 10       | 0.14          |
| (2,228)  | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 13       | 0.14          |
| (2,228)  | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 17       | 0.14          |
| (2,228)  | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 20       | 0.14          |
| (2,170)  | 1:11:A:LEU:HD11 | 1:103:A:ASP:H    | 15       | 0.14          |
| (2,170)  | 1:11:A:LEU:HD12 | 1:103:A:ASP:H    | 15       | 0.14          |
| (2,170)  | 1:11:A:LEU:HD13 | 1:103:A:ASP:H    | 15       | 0.14          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD11 | 6        | 0.14          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD12 | 6        | 0.14          |
| (2,161)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD13 | 6        | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 5        | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 5        | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 5        | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 12       | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 12       | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 12       | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 17       | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 17       | 0.14          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 17       | 0.14          |
| (2,57)   | 1:13:A:TYR:HD1  | 1:119:A:ILE:HG21 | 14       | 0.14          |
| (2,57)   | 1:13:A:TYR:HD1  | 1:119:A:ILE:HG22 | 14       | 0.14          |
| (2,57)   | 1:13:A:TYR:HD1  | 1:119:A:ILE:HG23 | 14       | 0.14          |
| (1,68)   | 1:46:A:LYS:O    | 1:50:A:GLU:H     | 3        | 0.14          |
| (1,60)   | 1:42:A:LYS:O    | 1:46:A:LYS:H     | 8        | 0.14          |
| (2,1194) | 1:11:A:LEU:CB   | 1:106:A:LYS:CG   | 6        | 0.13          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 1        | 0.13          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 6        | 0.13          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 8        | 0.13          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 16       | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:H     | 10       | 0.13          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:H     | 10       | 0.13          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:H     | 10       | 0.13          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 3        | 0.13          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 18       | 0.13          |
| (2,1080) | 1:121:A:LYS:H   | 1:122:A:ASN:HD21 | 15       | 0.13          |
| (2,1052) | 1:103:A:ASP:HB2 | 1:105:A:SER:H    | 7        | 0.13          |
| (2,1034) | 1:94:A:ASN:H    | 1:94:A:ASN:HD22  | 4        | 0.13          |
| (2,958)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 16       | 0.13          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 12       | 0.13          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 12       | 0.13          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 12       | 0.13          |
| (2,828)  | 1:88:A:LEU:HG   | 1:90:A:CYS:H     | 12       | 0.13          |
| (2,758)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:42:A:LYS:H     | 16       | 0.13          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 19       | 0.13          |
| (2,689)  | 1:2:A:SER:H     | 1:5:A:LYS:H      | 16       | 0.13          |
| (2,644)  | 1:8:A:GLU:HA    | 1:11:A:LEU:H     | 5        | 0.13          |
| (2,644)  | 1:8:A:GLU:HA    | 1:11:A:LEU:H     | 15       | 0.13          |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD11  | 19       | 0.13          |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD12  | 19       | 0.13          |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD13  | 19       | 0.13          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 17       | 0.13          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 17       | 0.13          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 17       | 0.13          |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 5        | 0.13          |
| (2,475)  | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:H     | 17       | 0.13          |
| (2,421)  | 1:99:A:TYR:H    | 1:100:A:PRO:HB3  | 11       | 0.13          |
| (2,393)  | 1:7:A:LEU:H     | 1:7:A:LEU:HG     | 6        | 0.13          |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB1  | 1:119:A:ILE:HA   | 13       | 0.13          |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB2  | 1:119:A:ILE:HA   | 13       | 0.13          |
| (2,331)  | 1:12:A:ALA:HB3  | 1:119:A:ILE:HA   | 13       | 0.13          |
| (2,322)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:123:A:ARG:HA   | 5        | 0.13          |
| (2,319)  | 1:149:A:TYR:HE1 | 1:150:A:LEU:HA   | 4        | 0.13          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 4        | 0.13          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 4        | 0.13          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 4        | 0.13          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 20       | 0.13          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 20       | 0.13          |
| (2,236)  | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 20       | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG21 | 5        | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG22 | 5        | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG23 | 5        | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG21 | 5        | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG22 | 5        | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG23 | 5        | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG21 | 5        | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG22 | 5        | 0.13          |
| (2,141)  | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG23 | 5        | 0.13          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 6        | 0.13          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 6        | 0.13          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 6        | 0.13          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 14       | 0.13          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 14       | 0.13          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 14       | 0.13          |
| (2,125)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD21 | 13       | 0.13          |
| (2,125)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD22 | 13       | 0.13          |
| (2,125)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD23 | 13       | 0.13          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 9        | 0.13          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 9        | 0.13          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 9        | 0.13          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 10       | 0.13          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 10       | 0.13          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 10       | 0.13          |
| (1,142)  | 1:109:A:GLU:O   | 1:113:A:LYS:H    | 5        | 0.13          |
| (1,134)  | 1:104:A:VAL:O   | 1:108:A:LYS:H    | 9        | 0.13          |
| (1,132)  | 1:103:A:ASP:O   | 1:107:A:ALA:H    | 8        | 0.13          |
| (1,120)  | 1:90:A:CYS:O    | 1:94:A:ASN:H     | 9        | 0.13          |
| (1,66)   | 1:45:A:VAL:O    | 1:49:A:LEU:H     | 13       | 0.13          |
| (1,66)   | 1:45:A:VAL:O    | 1:49:A:LEU:H     | 19       | 0.13          |
| (1,56)   | 1:29:A:ALA:O    | 1:33:A:ALA:H     | 17       | 0.13          |
| (2,1196) | 1:74:A:ARG:CG   | 1:75:A:GLU:CB    | 11       | 0.12          |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:HD21  | 19       | 0.12          |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:HD21  | 19       | 0.12          |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:HD21  | 19       | 0.12          |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:HD21  | 20       | 0.12          |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:HD21  | 20       | 0.12          |
| (2,1162) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:HD21  | 20       | 0.12          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 4        | 0.12          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 5        | 0.12          |
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 18       | 0.12          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG21 | 1:73:A:ASN:H     | 17       | 0.12          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG22 | 1:73:A:ASN:H     | 17       | 0.12          |
| (2,1102) | 1:70:A:THR:HG23 | 1:73:A:ASN:H     | 17       | 0.12          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 12       | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,958) | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 1        | 0.12          |
| (2,958) | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 20       | 0.12          |
| (2,919) | 1:41:A:GLY:H    | 1:43:A:GLU:H     | 9        | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 3        | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 3        | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 3        | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 8        | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 8        | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 8        | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 16       | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 16       | 0.12          |
| (2,903) | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 16       | 0.12          |
| (2,874) | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD21  | 14       | 0.12          |
| (2,874) | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD22  | 14       | 0.12          |
| (2,874) | 1:28:A:LEU:H    | 1:28:A:LEU:HD23  | 14       | 0.12          |
| (2,862) | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 16       | 0.12          |
| (2,828) | 1:88:A:LEU:HG   | 1:90:A:CYS:H     | 1        | 0.12          |
| (2,718) | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 2        | 0.12          |
| (2,718) | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 9        | 0.12          |
| (2,644) | 1:8:A:GLU:HA    | 1:11:A:LEU:H     | 4        | 0.12          |
| (2,559) | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 15       | 0.12          |
| (2,559) | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 15       | 0.12          |
| (2,559) | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 15       | 0.12          |
| (2,559) | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 19       | 0.12          |
| (2,559) | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 19       | 0.12          |
| (2,559) | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 19       | 0.12          |
| (2,524) | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 8        | 0.12          |
| (2,524) | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 14       | 0.12          |
| (2,524) | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 15       | 0.12          |
| (2,480) | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:HB2   | 19       | 0.12          |
| (2,475) | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:H     | 6        | 0.12          |
| (2,388) | 1:45:A:VAL:HB   | 1:46:A:LYS:HA    | 16       | 0.12          |
| (2,236) | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 16       | 0.12          |
| (2,236) | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 16       | 0.12          |
| (2,236) | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 16       | 0.12          |
| (2,236) | 1:31:A:VAL:HG11 | 1:74:A:ARG:HD3   | 18       | 0.12          |
| (2,236) | 1:31:A:VAL:HG12 | 1:74:A:ARG:HD3   | 18       | 0.12          |
| (2,236) | 1:31:A:VAL:HG13 | 1:74:A:ARG:HD3   | 18       | 0.12          |
| (2,228) | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 3        | 0.12          |
| (2,221) | 1:131:A:ASN:HA  | 1:134:A:CYS:HB2  | 7        | 0.12          |
| (2,192) | 1:62:A:ALA:HB1  | 1:63:A:GLN:HG3   | 20       | 0.12          |
| (2,192) | 1:62:A:ALA:HB2  | 1:63:A:GLN:HG3   | 20       | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,192)  | 1:62:A:ALA:HB3  | 1:63:A:GLN:HG3   | 20       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG11 | 1:146:A:ALA:HB1  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG11 | 1:146:A:ALA:HB2  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG11 | 1:146:A:ALA:HB3  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG12 | 1:146:A:ALA:HB1  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG12 | 1:146:A:ALA:HB2  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG12 | 1:146:A:ALA:HB3  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG13 | 1:146:A:ALA:HB1  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG13 | 1:146:A:ALA:HB2  | 16       | 0.12          |
| (2,164)  | 1:45:A:VAL:HG13 | 1:146:A:ALA:HB3  | 16       | 0.12          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 11       | 0.12          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 11       | 0.12          |
| (2,160)  | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 11       | 0.12          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 8        | 0.12          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 8        | 0.12          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 8        | 0.12          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 18       | 0.12          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 18       | 0.12          |
| (2,134)  | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 18       | 0.12          |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD21 | 12       | 0.12          |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD22 | 12       | 0.12          |
| (2,126)  | 1:120:A:LEU:HA  | 1:120:A:LEU:HD23 | 12       | 0.12          |
| (2,88)   | 1:48:A:ILE:HD11 | 1:80:A:LEU:HB3   | 9        | 0.12          |
| (2,88)   | 1:48:A:ILE:HD12 | 1:80:A:LEU:HB3   | 9        | 0.12          |
| (2,88)   | 1:48:A:ILE:HD13 | 1:80:A:LEU:HB3   | 9        | 0.12          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 1        | 0.12          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 1        | 0.12          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 1        | 0.12          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 2        | 0.12          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 2        | 0.12          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 2        | 0.12          |
| (1,134)  | 1:104:A:VAL:O   | 1:108:A:LYS:H    | 6        | 0.12          |
| (1,84)   | 1:62:A:ALA:O    | 1:66:A:GLU:H     | 2        | 0.12          |
| (1,84)   | 1:62:A:ALA:O    | 1:66:A:GLU:H     | 14       | 0.12          |
| (1,82)   | 1:61:A:VAL:O    | 1:65:A:ALA:H     | 12       | 0.12          |
| (1,76)   | 1:58:A:ALA:O    | 1:62:A:ALA:H     | 12       | 0.12          |
| (1,66)   | 1:45:A:VAL:O    | 1:49:A:LEU:H     | 20       | 0.12          |
| (1,53)   | 1:28:A:LEU:O    | 1:32:A:ASP:N     | 20       | 0.12          |
| (2,1196) | 1:74:A:ARG:CG   | 1:75:A:GLU:CB    | 5        | 0.11          |
| (2,1187) | 1:11:A:LEU:CD1  | 1:106:A:LYS:CG   | 16       | 0.11          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 11       | 0.11          |
| (2,1173) | 1:67:A:THR:H    | 1:68:A:GLY:HA3   | 12       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1153) | 1:37:A:LYS:H    | 1:68:A:GLY:H     | 10       | 0.11          |
| (2,1149) | 1:40:A:GLY:H    | 1:68:A:GLY:HA2   | 3        | 0.11          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 10       | 0.11          |
| (2,1090) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:117:A:GLU:H    | 17       | 0.11          |
| (2,1065) | 1:36:A:THR:H    | 1:71:A:GLU:H     | 9        | 0.11          |
| (2,958)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 8        | 0.11          |
| (2,919)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:43:A:GLU:H     | 2        | 0.11          |
| (2,919)  | 1:41:A:GLY:H    | 1:43:A:GLU:H     | 19       | 0.11          |
| (2,906)  | 1:98:A:LYS:H    | 1:99:A:TYR:HE1   | 7        | 0.11          |
| (2,906)  | 1:98:A:LYS:H    | 1:99:A:TYR:HE1   | 8        | 0.11          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 5        | 0.11          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 5        | 0.11          |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 5        | 0.11          |
| (2,897)  | 1:89:A:GLU:H    | 1:138:A:ALA:HB1  | 7        | 0.11          |
| (2,897)  | 1:89:A:GLU:H    | 1:138:A:ALA:HB2  | 7        | 0.11          |
| (2,897)  | 1:89:A:GLU:H    | 1:138:A:ALA:HB3  | 7        | 0.11          |
| (2,862)  | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 15       | 0.11          |
| (2,802)  | 1:14:A:LEU:H    | 1:107:A:ALA:HB1  | 12       | 0.11          |
| (2,802)  | 1:14:A:LEU:H    | 1:107:A:ALA:HB2  | 12       | 0.11          |
| (2,802)  | 1:14:A:LEU:H    | 1:107:A:ALA:HB3  | 12       | 0.11          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 3        | 0.11          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 7        | 0.11          |
| (2,718)  | 1:57:A:ILE:HG12 | 1:58:A:ALA:H     | 18       | 0.11          |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG21  | 3        | 0.11          |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG22  | 3        | 0.11          |
| (2,712)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:92:A:ILE:HG23  | 3        | 0.11          |
| (2,710)  | 1:91:A:GLU:H    | 1:91:A:GLU:HG3   | 4        | 0.11          |
| (2,648)  | 1:39:A:GLU:H    | 1:68:A:GLY:HA2   | 18       | 0.11          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 11       | 0.11          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 11       | 0.11          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 11       | 0.11          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 18       | 0.11          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 18       | 0.11          |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 18       | 0.11          |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 3        | 0.11          |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 10       | 0.11          |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 11       | 0.11          |
| (2,524)  | 1:24:A:ILE:H    | 1:24:A:ILE:HG13  | 18       | 0.11          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB1  | 3        | 0.11          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB2  | 3        | 0.11          |
| (2,509)  | 1:16:A:ILE:H    | 1:107:A:ALA:HB3  | 3        | 0.11          |
| (2,475)  | 1:53:A:ASP:H    | 1:56:A:GLU:H     | 18       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,421) | 1:99:A:TYR:H    | 1:100:A:PRO:HB3  | 19       | 0.11          |
| (2,373) | 1:94:A:ASN:HA   | 1:130:A:VAL:HB   | 13       | 0.11          |
| (2,373) | 1:94:A:ASN:HA   | 1:130:A:VAL:HB   | 15       | 0.11          |
| (2,286) | 1:90:A:CYS:HA   | 1:92:A:ILE:HG21  | 2        | 0.11          |
| (2,286) | 1:90:A:CYS:HA   | 1:92:A:ILE:HG22  | 2        | 0.11          |
| (2,286) | 1:90:A:CYS:HA   | 1:92:A:ILE:HG23  | 2        | 0.11          |
| (2,278) | 1:115:A:SER:HA  | 1:116:A:TYR:HB2  | 2        | 0.11          |
| (2,228) | 1:29:A:ALA:H    | 1:30:A:ARG:HD2   | 14       | 0.11          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD11 | 1:103:A:ASP:H    | 18       | 0.11          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD12 | 1:103:A:ASP:H    | 18       | 0.11          |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD13 | 1:103:A:ASP:H    | 18       | 0.11          |
| (2,169) | 1:80:A:LEU:HD21 | 1:146:A:ALA:H    | 17       | 0.11          |
| (2,169) | 1:80:A:LEU:HD22 | 1:146:A:ALA:H    | 17       | 0.11          |
| (2,169) | 1:80:A:LEU:HD23 | 1:146:A:ALA:H    | 17       | 0.11          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 1        | 0.11          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 1        | 0.11          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 1        | 0.11          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD11 | 19       | 0.11          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD12 | 19       | 0.11          |
| (2,160) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD13 | 19       | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG21 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG22 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB1 | 1:154:A:THR:HG23 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG21 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG22 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB2 | 1:154:A:THR:HG23 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG21 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG22 | 4        | 0.11          |
| (2,141) | 1:152:A:ALA:HB3 | 1:154:A:THR:HG23 | 4        | 0.11          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG21 | 1:69:A:VAL:HA    | 7        | 0.11          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG22 | 1:69:A:VAL:HA    | 7        | 0.11          |
| (2,134) | 1:36:A:THR:HG23 | 1:69:A:VAL:HA    | 7        | 0.11          |
| (2,131) | 1:35:A:VAL:HG11 | 1:70:A:THR:HB    | 3        | 0.11          |
| (2,131) | 1:35:A:VAL:HG12 | 1:70:A:THR:HB    | 3        | 0.11          |
| (2,131) | 1:35:A:VAL:HG13 | 1:70:A:THR:HB    | 3        | 0.11          |
| (2,125) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD21 | 5        | 0.11          |
| (2,125) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD22 | 5        | 0.11          |
| (2,125) | 1:116:A:TYR:HD1 | 1:120:A:LEU:HD23 | 5        | 0.11          |
| (2,120) | 1:75:A:GLU:HB3  | 1:76:A:ALA:HB1   | 2        | 0.11          |
| (2,120) | 1:75:A:GLU:HB3  | 1:76:A:ALA:HB2   | 2        | 0.11          |
| (2,120) | 1:75:A:GLU:HB3  | 1:76:A:ALA:HB3   | 2        | 0.11          |
| (2,82)  | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 19       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1          | Atom-2           | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 19       | 0.11          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 19       | 0.11          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD11 | 1:85:A:ARG:HA    | 20       | 0.11          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD12 | 1:85:A:ARG:HA    | 20       | 0.11          |
| (2,82)   | 1:24:A:ILE:HD13 | 1:85:A:ARG:HA    | 20       | 0.11          |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD11  | 20       | 0.11          |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD12  | 20       | 0.11          |
| (2,32)   | 1:91:A:GLU:HB2  | 1:95:A:ILE:HD13  | 20       | 0.11          |
| (1,142)  | 1:109:A:GLU:O   | 1:113:A:LYS:H    | 18       | 0.11          |
| (1,134)  | 1:104:A:VAL:O   | 1:108:A:LYS:H    | 5        | 0.11          |
| (1,134)  | 1:104:A:VAL:O   | 1:108:A:LYS:H    | 7        | 0.11          |
| (1,120)  | 1:90:A:CYS:O    | 1:94:A:ASN:H     | 6        | 0.11          |
| (1,92)   | 1:76:A:ALA:O    | 1:80:A:LEU:H     | 17       | 0.11          |
| (1,84)   | 1:62:A:ALA:O    | 1:66:A:GLU:H     | 6        | 0.11          |
| (1,84)   | 1:62:A:ALA:O    | 1:66:A:GLU:H     | 7        | 0.11          |
| (1,84)   | 1:62:A:ALA:O    | 1:66:A:GLU:H     | 16       | 0.11          |
| (1,66)   | 1:45:A:VAL:O    | 1:49:A:LEU:H     | 17       | 0.11          |
| (1,60)   | 1:42:A:LYS:O    | 1:46:A:LYS:H     | 10       | 0.11          |
| (1,56)   | 1:29:A:ALA:O    | 1:33:A:ALA:H     | 20       | 0.11          |
| (1,54)   | 1:28:A:LEU:O    | 1:32:A:ASP:H     | 1        | 0.11          |
| (1,48)   | 1:25:A:ASP:O    | 1:29:A:ALA:H     | 9        | 0.11          |
| (1,48)   | 1:25:A:ASP:O    | 1:29:A:ALA:H     | 11       | 0.11          |
| (1,48)   | 1:25:A:ASP:O    | 1:29:A:ALA:H     | 13       | 0.11          |
| (1,34)   | 1:18:A:LEU:O    | 1:22:A:GLU:H     | 16       | 0.11          |
| (2,1149) | 1:40:A:GLY:H    | 1:68:A:GLY:HA2   | 14       | 0.1           |
| (2,958)  | 1:35:A:VAL:HA   | 1:71:A:GLU:H     | 10       | 0.1           |
| (2,910)  | 1:114:A:MET:H   | 1:114:A:MET:HB3  | 16       | 0.1           |
| (2,906)  | 1:98:A:LYS:H    | 1:99:A:TYR:HE1   | 9        | 0.1           |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD11 | 11       | 0.1           |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD12 | 11       | 0.1           |
| (2,903)  | 1:118:A:GLU:H   | 1:119:A:ILE:HD13 | 11       | 0.1           |
| (2,862)  | 1:4:A:GLU:HA    | 1:8:A:GLU:H      | 7        | 0.1           |
| (2,828)  | 1:88:A:LEU:HG   | 1:90:A:CYS:H     | 11       | 0.1           |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB1   | 1:124:A:ASP:H    | 13       | 0.1           |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB2   | 1:124:A:ASP:H    | 13       | 0.1           |
| (2,620)  | 1:9:A:ALA:HB3   | 1:124:A:ASP:H    | 13       | 0.1           |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD11  | 11       | 0.1           |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD12  | 11       | 0.1           |
| (2,603)  | 1:95:A:ILE:H    | 1:95:A:ILE:HD13  | 11       | 0.1           |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG21  | 3        | 0.1           |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG22  | 3        | 0.1           |
| (2,559)  | 1:69:A:VAL:H    | 1:70:A:THR:HG23  | 3        | 0.1           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1           | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,524) | 1:24:A:ILE:H     | 1:24:A:ILE:HG13 | 7        | 0.1           |
| (2,524) | 1:24:A:ILE:H     | 1:24:A:ILE:HG13 | 20       | 0.1           |
| (2,509) | 1:16:A:ILE:H     | 1:107:A:ALA:HB1 | 1        | 0.1           |
| (2,509) | 1:16:A:ILE:H     | 1:107:A:ALA:HB2 | 1        | 0.1           |
| (2,509) | 1:16:A:ILE:H     | 1:107:A:ALA:HB3 | 1        | 0.1           |
| (2,509) | 1:16:A:ILE:H     | 1:107:A:ALA:HB1 | 16       | 0.1           |
| (2,509) | 1:16:A:ILE:H     | 1:107:A:ALA:HB2 | 16       | 0.1           |
| (2,509) | 1:16:A:ILE:H     | 1:107:A:ALA:HB3 | 16       | 0.1           |
| (2,207) | 1:94:A:ASN:H     | 1:130:A:VAL:HB  | 17       | 0.1           |
| (2,171) | 1:102:A:LEU:HD21 | 1:103:A:ASP:HA  | 13       | 0.1           |
| (2,171) | 1:102:A:LEU:HD22 | 1:103:A:ASP:HA  | 13       | 0.1           |
| (2,171) | 1:102:A:LEU:HD23 | 1:103:A:ASP:HA  | 13       | 0.1           |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD11  | 1:103:A:ASP:H   | 5        | 0.1           |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD12  | 1:103:A:ASP:H   | 5        | 0.1           |
| (2,170) | 1:11:A:LEU:HD13  | 1:103:A:ASP:H   | 5        | 0.1           |
| (2,120) | 1:75:A:GLU:HB3   | 1:76:A:ALA:HB1  | 16       | 0.1           |
| (2,120) | 1:75:A:GLU:HB3   | 1:76:A:ALA:HB2  | 16       | 0.1           |
| (2,120) | 1:75:A:GLU:HB3   | 1:76:A:ALA:HB3  | 16       | 0.1           |
| (1,133) | 1:104:A:VAL:O    | 1:108:A:LYS:N   | 9        | 0.1           |
| (1,84)  | 1:62:A:ALA:O     | 1:66:A:GLU:H    | 13       | 0.1           |
| (1,82)  | 1:61:A:VAL:O     | 1:65:A:ALA:H    | 16       | 0.1           |
| (1,66)  | 1:45:A:VAL:O     | 1:49:A:LEU:H    | 10       | 0.1           |
| (1,66)  | 1:45:A:VAL:O     | 1:49:A:LEU:H    | 12       | 0.1           |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:O     | 1:33:A:ALA:H    | 8        | 0.1           |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:O     | 1:33:A:ALA:H    | 9        | 0.1           |

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

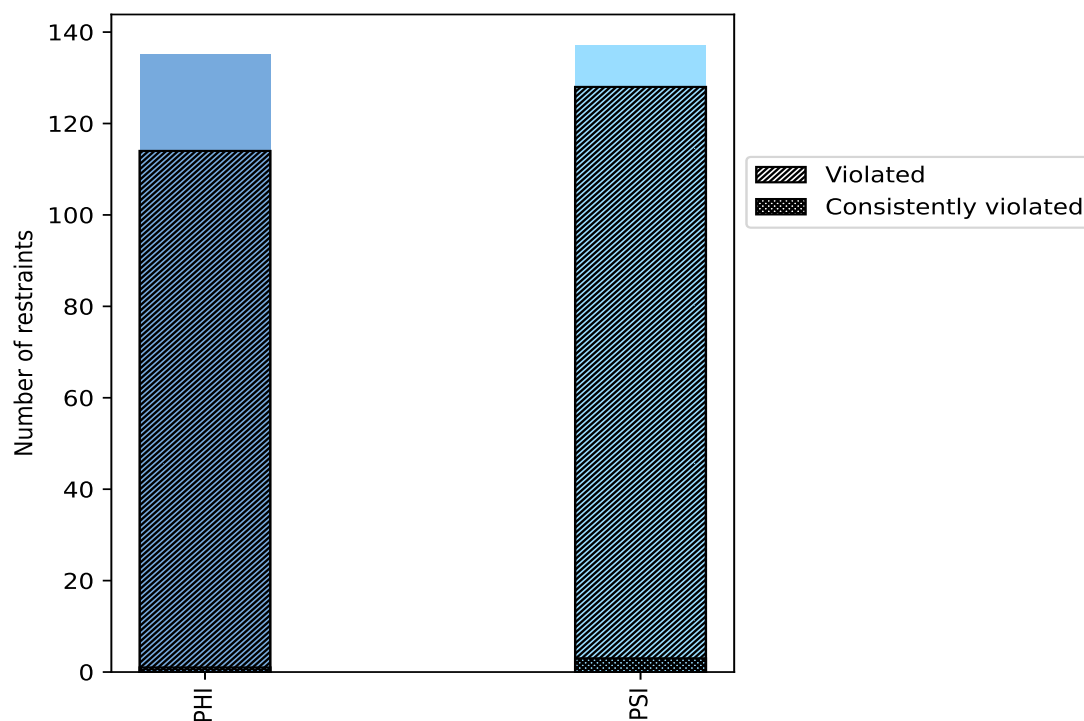
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

| Angle type | Count | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|            |       |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| PHI        | 135   | 49.6           | 114                   | 84.4           | 41.9           | 1                                  | 0.7            | 0.4            |
| PSI        | 137   | 50.4           | 128                   | 93.4           | 47.1           | 3                                  | 2.2            | 1.1            |
| Total      | 272   | 100.0          | 242                   | 89.0           | 89.0           | 4                                  | 1.5            | 1.5            |

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

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



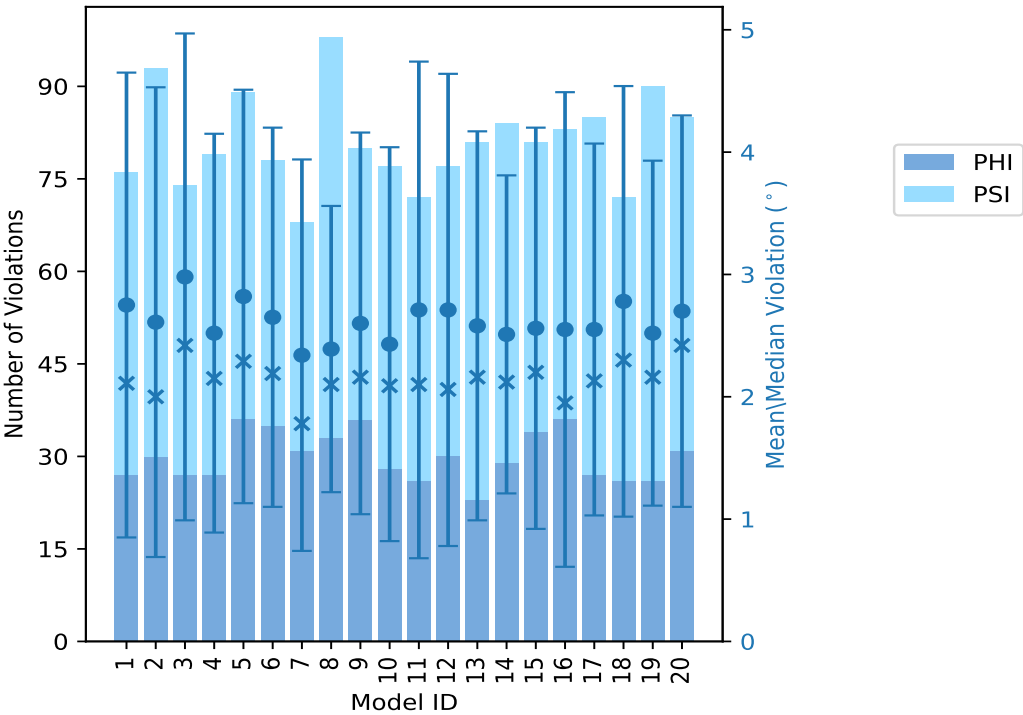
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

## 10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

| Model ID | Number of violations |     |       | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
|          | PHI                  | PSI | Total |          |         |        |            |
| 1        | 27                   | 49  | 76    | 2.75     | 11.46   | 1.9    | 2.11       |
| 2        | 30                   | 63  | 93    | 2.61     | 12.91   | 1.92   | 2.0        |
| 3        | 27                   | 47  | 74    | 2.98     | 12.19   | 1.99   | 2.42       |
| 4        | 27                   | 52  | 79    | 2.52     | 10.95   | 1.63   | 2.15       |
| 5        | 36                   | 53  | 89    | 2.82     | 9.86    | 1.69   | 2.29       |
| 6        | 35                   | 43  | 78    | 2.65     | 8.14    | 1.55   | 2.19       |
| 7        | 31                   | 37  | 68    | 2.34     | 9.3     | 1.6    | 1.78       |
| 8        | 33                   | 65  | 98    | 2.39     | 6.83    | 1.17   | 2.1        |
| 9        | 36                   | 44  | 80    | 2.6      | 9.07    | 1.56   | 2.16       |
| 10       | 28                   | 49  | 77    | 2.43     | 10.06   | 1.61   | 2.09       |
| 11       | 26                   | 46  | 72    | 2.71     | 13.97   | 2.03   | 2.1        |
| 12       | 30                   | 47  | 77    | 2.71     | 12.35   | 1.93   | 2.06       |
| 13       | 23                   | 58  | 81    | 2.58     | 9.38    | 1.59   | 2.16       |
| 14       | 29                   | 55  | 84    | 2.51     | 7.56    | 1.3    | 2.12       |
| 15       | 34                   | 47  | 81    | 2.56     | 9.63    | 1.64   | 2.2        |
| 16       | 36                   | 47  | 83    | 2.55     | 12.74   | 1.94   | 1.95       |
| 17       | 27                   | 58  | 85    | 2.55     | 9.21    | 1.52   | 2.13       |
| 18       | 26                   | 46  | 72    | 2.78     | 10.57   | 1.76   | 2.3        |
| 19       | 26                   | 64  | 90    | 2.52     | 9.08    | 1.41   | 2.16       |
| 20       | 31                   | 54  | 85    | 2.7      | 10.85   | 1.6    | 2.42       |

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model ⓘ



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 ⓘ

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

| Number of violated restraints |     |       | Fraction of the ensemble |      |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|------|
| PHI                           | PSI | Total | Count <sup>1</sup>       | %    |
| 28                            | 8   | 36    | 1                        | 5.0  |
| 15                            | 7   | 22    | 2                        | 10.0 |
| 9                             | 6   | 15    | 3                        | 15.0 |
| 9                             | 8   | 17    | 4                        | 20.0 |
| 7                             | 17  | 24    | 5                        | 25.0 |
| 14                            | 13  | 27    | 6                        | 30.0 |
| 7                             | 10  | 17    | 7                        | 35.0 |
| 4                             | 10  | 14    | 8                        | 40.0 |
| 4                             | 5   | 9     | 9                        | 45.0 |
| 1                             | 11  | 12    | 10                       | 50.0 |
| 2                             | 5   | 7     | 11                       | 55.0 |

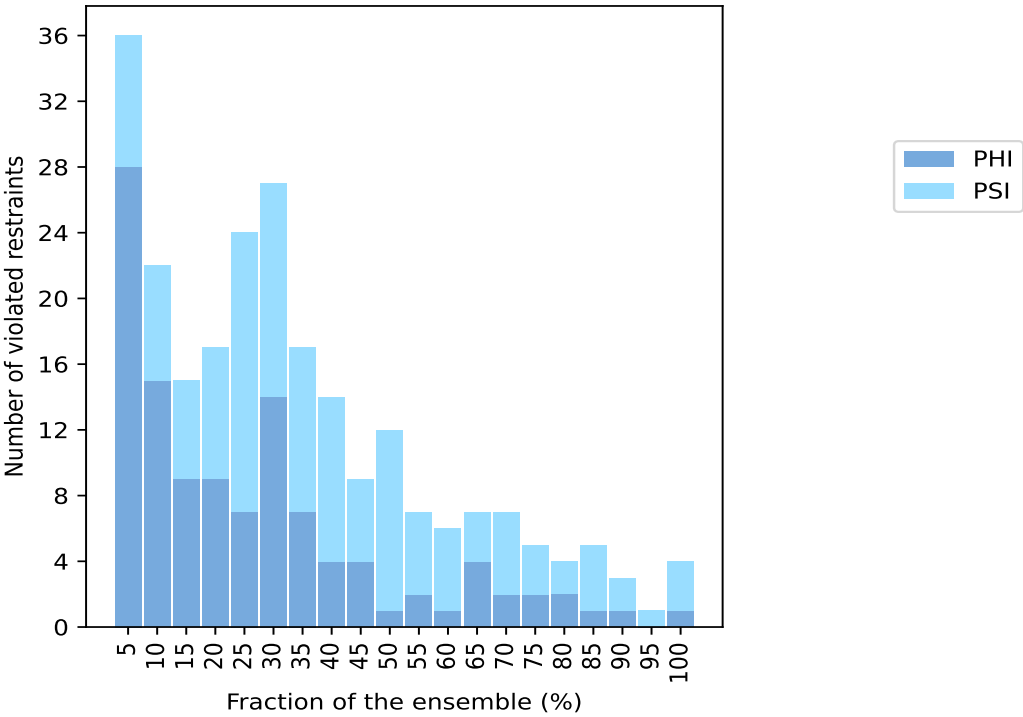
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints |     |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PHI                           | PSI | Total | Count <sup>1</sup>       | %     |
| 1                             | 5   | 6     | 12                       | 60.0  |
| 4                             | 3   | 7     | 13                       | 65.0  |
| 2                             | 5   | 7     | 14                       | 70.0  |
| 2                             | 3   | 5     | 15                       | 75.0  |
| 2                             | 2   | 4     | 16                       | 80.0  |
| 1                             | 4   | 5     | 17                       | 85.0  |
| 1                             | 2   | 3     | 18                       | 90.0  |
| 0                             | 1   | 1     | 19                       | 95.0  |
| 1                             | 3   | 4     | 20                       | 100.0 |

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

10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble ⓘ

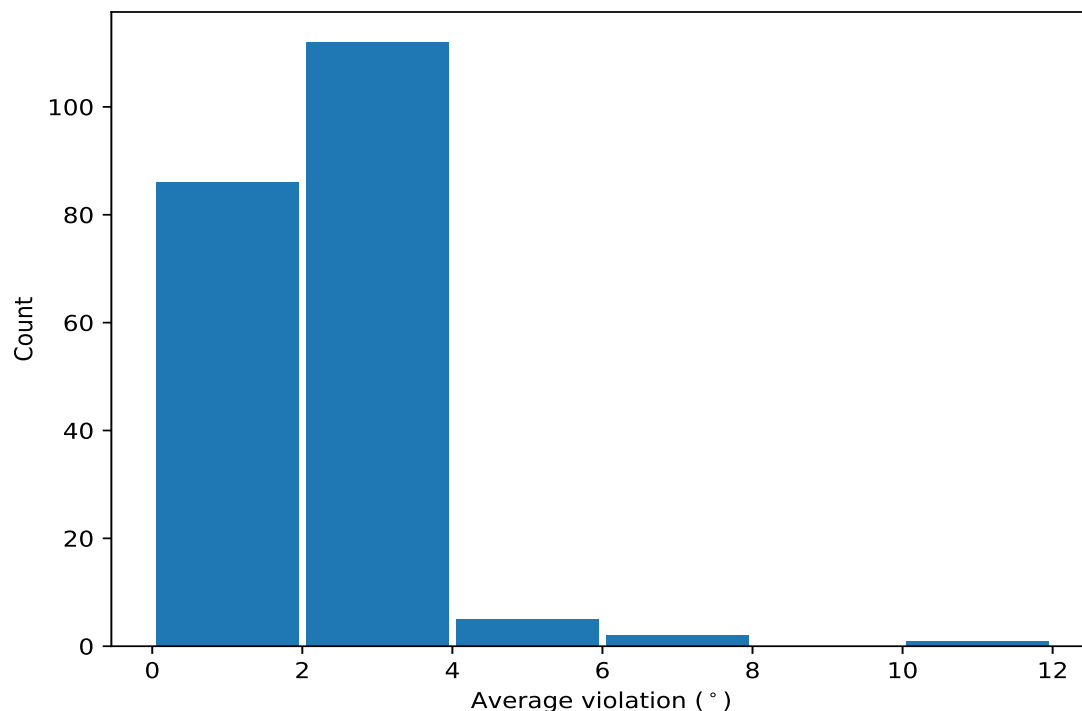


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble ⓘ

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations ⓘ

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 ⓘ

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

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 20                  | 10.1 | 2.01            | 9.96   |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 20                  | 6.81 | 2.11            | 7.58   |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 20                  | 3.88 | 1.85            | 3.85   |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 20                  | 3.21 | 1.28            | 2.99   |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 19                  | 3.76 | 1.37            | 3.71   |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 18                  | 4.0  | 1.52            | 3.78   |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 18                  | 3.46 | 0.99            | 3.3    |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 18                  | 3.46 | 1.53            | 3.19   |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 17                  | 4.51 | 2.27            | 4.48   |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 17                  | 4.32 | 1.36            | 4.12   |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 17                  | 3.04 | 1.18            | 2.86   |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 17                  | 2.68 | 1.09            | 2.63   |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 17                  | 2.26 | 0.94            | 1.9    |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 16                  | 6.75 | 2.54            | 7.58   |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 16                  | 3.38 | 1.16            | 3.54   |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 16                  | 2.37 | 0.97            | 2.0    |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 16                  | 2.04 | 0.56            | 2.12   |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 15                  | 3.22 | 1.16            | 3.5    |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 15                  | 2.96 | 1.53            | 2.82   |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 15                  | 2.75 | 1.31            | 2.6    |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 15                  | 2.36 | 1.19            | 2.18   |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 15                  | 1.81 | 0.54            | 1.8    |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 14                  | 3.16 | 1.41            | 3.24   |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 14                  | 2.83 | 1.21            | 2.8    |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 14                  | 2.64 | 1.1             | 2.68   |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 14                  | 2.48 | 1.12            | 2.32   |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 14                  | 2.1  | 0.7             | 1.88   |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 14                  | 2.08 | 0.7             | 2.04   |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 14                  | 1.97 | 1.06            | 1.6    |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 13                  | 4.03 | 1.95            | 3.4    |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 13                  | 3.83 | 1.98            | 3.08   |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 13                  | 2.77 | 1.12            | 2.7    |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 13                  | 2.63 | 0.77            | 2.42   |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 13                  | 2.3  | 0.91            | 1.98   |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 13                  | 2.2  | 0.65            | 2.06   |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 13                  | 2.13 | 0.56            | 2.13   |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 12                  | 3.05 | 1.19            | 3.23   |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 12                  | 2.94 | 1.98            | 2.09   |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 12                  | 2.79 | 0.89            | 2.7    |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 12                  | 2.5  | 1.14            | 2.18   |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 12                  | 2.4  | 0.82            | 2.26   |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 12                  | 2.19 | 0.75            | 2.04   |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 11                  | 2.84 | 1.11            | 2.53   |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 11                  | 2.73 | 1.21            | 2.39   |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 11                  | 2.46 | 0.73            | 2.33   |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 11                  | 2.38 | 0.84            | 2.19   |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 11                  | 1.97 | 0.71            | 1.98   |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 11                  | 1.88 | 0.8             | 1.64   |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 11                  | 1.58 | 0.31            | 1.54   |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 10                  | 3.18 | 1.61            | 2.48   |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 10                  | 2.84 | 1.11            | 2.51   |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 10                  | 2.81 | 1.2             | 2.69   |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 10                  | 2.79 | 1.05            | 2.57   |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 10                  | 2.77 | 1.38            | 2.7    |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 10                  | 2.76 | 1.16            | 2.27   |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 10                  | 2.44 | 0.99            | 2.32   |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 10                  | 2.43 | 0.84            | 2.47   |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 10                  | 2.38 | 1.49            | 1.84   |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 10                  | 2.21 | 1.17            | 1.76   |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 10                  | 2.2  | 0.89            | 1.99   |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 10                  | 1.9  | 0.88            | 1.67   |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 9                   | 2.67 | 1.66            | 2.08   |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 9                   | 2.55 | 1.63            | 2.09   |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 9                   | 2.33 | 0.52            | 2.16   |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 9                   | 2.13 | 0.86            | 2.08   |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 9                   | 2.09 | 0.73            | 2.31   |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 9                   | 1.96 | 0.59            | 1.69   |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 9                   | 1.88 | 0.54            | 2.15   |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 9                   | 1.82 | 0.51            | 1.62   |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 9                   | 1.59 | 0.46            | 1.51   |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 8                   | 2.89 | 1.36            | 2.8    |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 8                   | 2.82 | 1.04            | 2.57   |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 8                   | 2.68 | 0.99            | 2.39   |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 8                   | 2.54 | 1.13            | 2.14   |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 8                   | 2.48 | 1.73            | 1.5    |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 8                   | 2.41 | 0.81            | 2.26   |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 8                   | 2.41 | 0.77            | 2.24   |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 8                   | 2.37 | 1.19            | 2.16   |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 8                   | 2.15 | 0.8             | 1.98   |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 8                   | 2.14 | 0.56            | 1.94   |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 8                   | 2.08 | 1.0             | 1.75   |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 8                   | 2.05 | 0.77            | 1.72   |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 8                   | 1.86 | 0.33            | 1.86   |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 8                   | 1.64 | 0.47            | 1.48   |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 7                   | 4.33 | 1.99            | 4.65   |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 7                   | 2.96 | 0.93            | 3.03   |
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 7                   | 2.4  | 0.92            | 2.27   |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 7                   | 2.32 | 0.82            | 1.97   |
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 7                   | 2.32 | 0.34            | 2.27   |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 7                   | 2.24 | 0.94            | 2.01   |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 7                   | 2.19 | 1.34            | 1.36   |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 7                   | 2.14 | 0.66            | 2.08   |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 7                   | 2.1  | 0.99            | 1.41   |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 7                   | 2.02 | 1.13            | 1.31   |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 7                   | 1.99 | 0.82            | 1.82   |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 7                   | 1.98 | 0.68            | 1.55   |
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 7                   | 1.8  | 0.65            | 1.53   |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 7                   | 1.75 | 0.44            | 1.74   |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 7                   | 1.7  | 0.58            | 1.57   |
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 7                   | 1.6  | 0.28            | 1.71   |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 7                   | 1.55 | 0.44            | 1.4    |
| (1,101) | 1:59:A:GLU:N  | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C   | 1:60:A:ALA:N  | 6                   | 2.79 | 1.1             | 2.99   |
| (1,93)  | 1:55:A:ARG:N  | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C   | 1:56:A:GLU:N  | 6                   | 2.65 | 1.32            | 2.55   |
| (1,69)  | 1:42:A:LYS:C  | 1:43:A:GLU:N   | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C  | 6                   | 2.6  | 1.45            | 2.06   |
| (1,109) | 1:63:A:GLN:N  | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C   | 1:64:A:LEU:N  | 6                   | 2.58 | 1.32            | 2.09   |
| (1,135) | 1:76:A:ALA:N  | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C   | 1:77:A:ALA:N  | 6                   | 2.36 | 0.64            | 2.2    |
| (1,23)  | 1:12:A:ALA:C  | 1:13:A:TYR:N   | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C  | 6                   | 2.3  | 0.85            | 2.6    |
| (1,63)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:VAL:N   | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C  | 6                   | 2.29 | 0.47            | 2.26   |
| (1,231) | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N  | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 6                   | 2.28 | 0.98            | 1.92   |
| (1,238) | 1:135:A:LEU:N | 1:135:A:LEU:CA | 1:135:A:LEU:C  | 1:136:A:GLU:N | 6                   | 2.25 | 1.17            | 1.8    |
| (1,177) | 1:97:A:LYS:N  | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C   | 1:98:A:LYS:N  | 6                   | 2.23 | 1.28            | 1.7    |
| (1,113) | 1:65:A:ALA:N  | 1:65:A:ALA:CA  | 1:65:A:ALA:C   | 1:66:A:GLU:N  | 6                   | 2.16 | 0.59            | 1.97   |
| (1,20)  | 1:11:A:LEU:N  | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C   | 1:12:A:ALA:N  | 6                   | 2.12 | 1.53            | 1.32   |
| (1,128) | 1:72:A:GLU:C  | 1:73:A:ASN:N   | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C  | 6                   | 2.11 | 0.72            | 2.1    |
| (1,4)   | 1:3:A:MET:N   | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C    | 1:4:A:GLU:N   | 6                   | 2.1  | 0.77            | 2.0    |
| (1,180) | 1:98:A:LYS:C  | 1:99:A:TYR:N   | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C  | 6                   | 2.09 | 0.73            | 1.92   |
| (1,217) | 1:117:A:GLU:C | 1:118:A:GLU:N  | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C | 6                   | 2.08 | 1.02            | 1.7    |
| (1,212) | 1:115:A:SER:N | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C  | 1:116:A:TYR:N | 6                   | 2.03 | 1.23            | 1.66   |
| (1,209) | 1:113:A:LYS:C | 1:114:A:MET:N  | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C | 6                   | 2.0  | 0.78            | 1.73   |
| (1,233) | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:GLU:N  | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C | 6                   | 1.84 | 0.65            | 1.67   |
| (1,9)   | 1:5:A:LYS:C   | 1:6:A:LYS:N    | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C   | 6                   | 1.79 | 0.57            | 1.68   |
| (1,200) | 1:109:A:GLU:N | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C  | 1:110:A:ALA:N | 6                   | 1.76 | 0.65            | 1.48   |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,174) | 1:95:A:ILE:C  | 1:96:A:LEU:N   | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C  | 6                   | 1.73 | 0.31            | 1.62   |
| (1,59)  | 1:30:A:ARG:C  | 1:31:A:VAL:N   | 1:31:A:VAL:CA  | 1:31:A:VAL:C  | 6                   | 1.73 | 0.33            | 1.63   |
| (1,143) | 1:80:A:LEU:N  | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C   | 1:81:A:MET:N  | 6                   | 1.57 | 0.58            | 1.44   |
| (1,264) | 1:148:A:LYS:N | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C  | 1:149:A:TYR:N | 6                   | 1.53 | 0.26            | 1.5    |
| (1,27)  | 1:14:A:LEU:C  | 1:15:A:GLY:N   | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C  | 6                   | 1.41 | 0.22            | 1.48   |
| (1,75)  | 1:45:A:VAL:C  | 1:46:A:LYS:N   | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C  | 6                   | 1.36 | 0.39            | 1.22   |
| (1,240) | 1:136:A:GLU:N | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C  | 1:137:A:LYS:N | 5                   | 3.21 | 0.76            | 3.39   |
| (1,234) | 1:133:A:GLU:N | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C  | 1:134:A:CYS:N | 5                   | 3.17 | 1.5             | 3.47   |
| (1,127) | 1:72:A:GLU:N  | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C   | 1:73:A:ASN:N  | 5                   | 2.69 | 1.51            | 2.48   |
| (1,26)  | 1:14:A:LEU:N  | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C   | 1:15:A:GLY:N  | 5                   | 2.53 | 2.17            | 1.66   |
| (1,192) | 1:105:A:SER:N | 1:105:A:SER:CA | 1:105:A:SER:C  | 1:106:A:LYS:N | 5                   | 2.48 | 0.75            | 2.5    |
| (1,71)  | 1:43:A:GLU:C  | 1:44:A:LEU:N   | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C  | 5                   | 2.34 | 0.74            | 2.26   |
| (1,221) | 1:119:A:ILE:C | 1:120:A:LEU:N  | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C | 5                   | 2.28 | 0.98            | 2.76   |
| (1,88)  | 1:52:A:THR:N  | 1:52:A:THR:CA  | 1:52:A:THR:C   | 1:53:A:ASP:N  | 5                   | 2.24 | 0.87            | 2.12   |
| (1,218) | 1:118:A:GLU:N | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C  | 1:119:A:ILE:N | 5                   | 2.12 | 0.98            | 2.13   |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ILE:N  | 5                   | 2.11 | 0.82            | 1.88   |
| (1,168) | 1:92:A:ILE:C  | 1:93:A:GLU:N   | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C  | 5                   | 2.09 | 0.9             | 1.57   |
| (1,253) | 1:142:A:VAL:C | 1:143:A:LYS:N  | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C | 5                   | 1.89 | 0.74            | 1.52   |
| (1,242) | 1:137:A:LYS:N | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C  | 1:138:A:ALA:N | 5                   | 1.86 | 0.93            | 1.43   |
| (1,262) | 1:147:A:ALA:N | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C  | 1:148:A:LYS:N | 5                   | 1.84 | 0.5             | 1.64   |
| (1,10)  | 1:6:A:LYS:N   | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C    | 1:7:A:LEU:N   | 5                   | 1.81 | 0.53            | 1.67   |
| (1,227) | 1:129:A:GLU:C | 1:130:A:VAL:N  | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C | 5                   | 1.78 | 0.56            | 1.65   |
| (1,8)   | 1:5:A:LYS:N   | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C    | 1:6:A:LYS:N   | 5                   | 1.67 | 0.69            | 1.28   |
| (1,244) | 1:138:A:ALA:N | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C  | 1:139:A:ARG:N | 5                   | 1.67 | 0.44            | 1.55   |
| (1,78)  | 1:47:A:LYS:N  | 1:47:A:LYS:CA  | 1:47:A:LYS:C   | 1:48:A:ILE:N  | 5                   | 1.66 | 0.5             | 1.68   |
| (1,148) | 1:82:A:LYS:C  | 1:83:A:ALA:N   | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C  | 5                   | 1.6  | 0.31            | 1.57   |
| (1,46)  | 1:24:A:ILE:N  | 1:24:A:ILE:CA  | 1:24:A:ILE:C   | 1:25:A:ASP:N  | 5                   | 1.59 | 0.34            | 1.6    |
| (1,13)  | 1:7:A:LEU:C   | 1:8:A:GLU:N    | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C   | 5                   | 1.55 | 0.47            | 1.35   |
| (1,137) | 1:77:A:ALA:N  | 1:77:A:ALA:CA  | 1:77:A:ALA:C   | 1:78:A:LYS:N  | 5                   | 1.46 | 0.26            | 1.48   |
| (1,54)  | 1:28:A:LEU:N  | 1:28:A:LEU:CA  | 1:28:A:LEU:C   | 1:29:A:ALA:N  | 5                   | 1.44 | 0.4             | 1.23   |
| (1,67)  | 1:41:A:GLY:C  | 1:42:A:LYS:N   | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C  | 4                   | 2.49 | 1.58            | 1.81   |
| (1,160) | 1:88:A:LEU:C  | 1:89:A:GLU:N   | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C  | 4                   | 2.42 | 1.49            | 1.8    |
| (1,164) | 1:90:A:CYS:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 4                   | 2.22 | 0.96            | 1.88   |
| (1,94)  | 1:55:A:ARG:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 4                   | 1.94 | 0.46            | 2.02   |
| (1,186) | 1:102:A:LEU:N | 1:102:A:LEU:CA | 1:102:A:LEU:C  | 1:103:A:ASP:N | 4                   | 1.89 | 0.47            | 1.79   |
| (1,169) | 1:93:A:GLU:N  | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C   | 1:94:A:ASN:N  | 4                   | 1.85 | 0.11            | 1.82   |
| (1,149) | 1:83:A:ALA:N  | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C   | 1:84:A:VAL:N  | 4                   | 1.75 | 0.41            | 1.89   |
| (1,79)  | 1:47:A:LYS:C  | 1:48:A:ILE:N   | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C  | 4                   | 1.75 | 0.8             | 1.44   |
| (1,7)   | 1:4:A:GLU:C   | 1:5:A:LYS:N    | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C   | 4                   | 1.66 | 0.67            | 1.28   |
| (1,2)   | 1:2:A:SER:N   | 1:2:A:SER:CA   | 1:2:A:SER:C    | 1:3:A:MET:N   | 4                   | 1.63 | 0.73            | 1.28   |
| (1,161) | 1:89:A:GLU:N  | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C   | 1:90:A:CYS:N  | 4                   | 1.59 | 0.34            | 1.44   |
| (1,58)  | 1:30:A:ARG:N  | 1:30:A:ARG:CA  | 1:30:A:ARG:C   | 1:31:A:VAL:N  | 4                   | 1.58 | 0.21            | 1.53   |
| (1,151) | 1:84:A:VAL:N  | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C   | 1:85:A:ARG:N  | 4                   | 1.58 | 0.37            | 1.54   |
| (1,144) | 1:80:A:LEU:C  | 1:81:A:MET:N   | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C  | 4                   | 1.45 | 0.45            | 1.32   |
| (1,84)  | 1:50:A:GLU:N  | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C   | 1:51:A:SER:N  | 4                   | 1.41 | 0.39            | 1.32   |
| (1,239) | 1:135:A:LEU:C | 1:136:A:GLU:N  | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C | 4                   | 1.34 | 0.26            | 1.37   |
| (1,183) | 1:100:A:PRO:C | 1:101:A:GLU:N  | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C | 4                   | 1.29 | 0.3             | 1.15   |
| (1,81)  | 1:48:A:ILE:C  | 1:49:A:LEU:N   | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C  | 3                   | 2.34 | 0.88            | 1.72   |
| (1,236) | 1:134:A:CYS:N | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C  | 1:135:A:LEU:N | 3                   | 2.29 | 0.16            | 2.4    |
| (1,89)  | 1:52:A:THR:C  | 1:53:A:ASP:N   | 1:53:A:ASP:CA  | 1:53:A:ASP:C  | 3                   | 2.01 | 0.29            | 1.89   |
| (1,173) | 1:95:A:ILE:N  | 1:95:A:ILE:CA  | 1:95:A:ILE:C   | 1:96:A:LEU:N  | 3                   | 1.96 | 0.8             | 1.73   |

Continued on next page...

Continued from previous page...

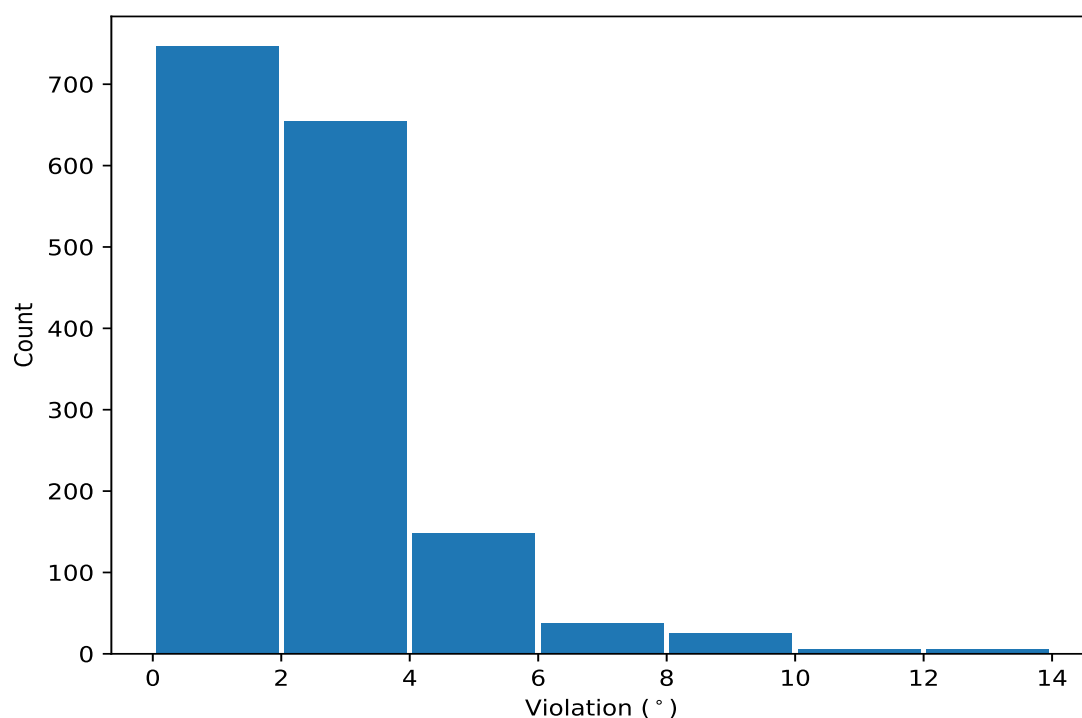
| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,121) | 1:69:A:VAL:N  | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C   | 1:70:A:THR:N  | 3                   | 1.86 | 0.38            | 1.85   |
| (1,247) | 1:139:A:ARG:C | 1:140:A:GLU:N  | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C | 3                   | 1.84 | 0.69            | 1.76   |
| (1,163) | 1:90:A:CYS:N  | 1:90:A:CYS:CA  | 1:90:A:CYS:C   | 1:91:A:GLU:N  | 3                   | 1.57 | 0.36            | 1.78   |
| (1,100) | 1:58:A:ALA:C  | 1:59:A:GLU:N   | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C  | 3                   | 1.45 | 0.28            | 1.56   |
| (1,216) | 1:117:A:GLU:N | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C  | 1:118:A:GLU:N | 3                   | 1.43 | 0.04            | 1.45   |
| (1,37)  | 1:19:A:GLU:C  | 1:20:A:SER:N   | 1:20:A:SER:CA  | 1:20:A:SER:C  | 3                   | 1.42 | 0.29            | 1.51   |
| (1,197) | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:LYS:N  | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C | 3                   | 1.42 | 0.18            | 1.4    |
| (1,110) | 1:63:A:GLN:C  | 1:64:A:LEU:N   | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C  | 3                   | 1.24 | 0.22            | 1.2    |
| (1,28)  | 1:15:A:GLY:N  | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C   | 1:16:A:ILE:N  | 3                   | 1.21 | 0.16            | 1.22   |
| (1,15)  | 1:8:A:GLU:C   | 1:9:A:ALA:N    | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C   | 3                   | 1.21 | 0.1             | 1.25   |
| (1,126) | 1:71:A:GLU:C  | 1:72:A:GLU:N   | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C  | 3                   | 1.17 | 0.14            | 1.18   |
| (1,213) | 1:115:A:SER:C | 1:116:A:TYR:N  | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C | 2                   | 2.32 | 0.29            | 2.32   |
| (1,142) | 1:79:A:GLU:C  | 1:80:A:LEU:N   | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C  | 2                   | 2.25 | 0.4             | 2.25   |
| (1,85)  | 1:50:A:GLU:C  | 1:51:A:SER:N   | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C  | 2                   | 2.09 | 1.02            | 2.09   |
| (1,68)  | 1:42:A:LYS:N  | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C   | 1:43:A:GLU:N  | 2                   | 1.91 | 0.78            | 1.91   |
| (1,261) | 1:146:A:ALA:C | 1:147:A:ALA:N  | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C | 2                   | 1.9  | 0.45            | 1.9    |
| (1,267) | 1:149:A:TYR:C | 1:150:A:LEU:N  | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C | 2                   | 1.85 | 0.24            | 1.85   |
| (1,29)  | 1:15:A:GLY:C  | 1:16:A:ILE:N   | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C  | 2                   | 1.84 | 0.62            | 1.84   |
| (1,188) | 1:103:A:ASP:N | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C  | 1:104:A:VAL:N | 2                   | 1.82 | 0.78            | 1.82   |
| (1,202) | 1:110:A:ALA:N | 1:110:A:ALA:CA | 1:110:A:ALA:C  | 1:111:A:LEU:N | 2                   | 1.74 | 0.44            | 1.74   |
| (1,266) | 1:149:A:TYR:N | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C  | 1:150:A:LEU:N | 2                   | 1.72 | 0.45            | 1.72   |
| (1,5)   | 1:3:A:MET:C   | 1:4:A:GLU:N    | 1:4:A:GLU:CA   | 1:4:A:GLU:C   | 2                   | 1.7  | 0.7             | 1.7    |
| (1,145) | 1:81:A:MET:N  | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C   | 1:82:A:LYS:N  | 2                   | 1.6  | 0.28            | 1.6    |
| (1,243) | 1:137:A:LYS:C | 1:138:A:ALA:N  | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C | 2                   | 1.55 | 0.01            | 1.55   |
| (1,51)  | 1:26:A:ALA:C  | 1:27:A:ALA:N   | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C  | 2                   | 1.54 | 0.16            | 1.54   |
| (1,11)  | 1:6:A:LYS:C   | 1:7:A:LEU:N    | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C   | 2                   | 1.5  | 0.33            | 1.5    |
| (1,206) | 1:112:A:ALA:N | 1:112:A:ALA:CA | 1:112:A:ALA:C  | 1:113:A:LYS:N | 2                   | 1.49 | 0.47            | 1.49   |
| (1,36)  | 1:19:A:GLU:N  | 1:19:A:GLU:CA  | 1:19:A:GLU:C   | 1:20:A:SER:N  | 2                   | 1.36 | 0.1             | 1.36   |
| (1,83)  | 1:49:A:LEU:C  | 1:50:A:GLU:N   | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C  | 2                   | 1.35 | 0.23            | 1.35   |
| (1,199) | 1:108:A:LYS:C | 1:109:A:GLU:N  | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C | 2                   | 1.32 | 0.1             | 1.32   |
| (1,146) | 1:81:A:MET:C  | 1:82:A:LYS:N   | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C  | 2                   | 1.26 | 0.03            | 1.26   |
| (1,150) | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:VAL:N   | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C  | 2                   | 1.14 | 0.05            | 1.14   |
| (1,138) | 1:77:A:ALA:C  | 1:78:A:LYS:N   | 1:78:A:LYS:CA  | 1:78:A:LYS:C  | 2                   | 1.14 | 0.04            | 1.14   |

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

## 10.5 All violated dihedral-angle restraints ⓘ

### 10.5.1 Histogram : Distribution of violations ⓘ

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) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 11       | 13.97         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 2        | 12.91         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 16       | 12.74         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 12       | 12.35         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 3        | 12.19         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 1        | 11.46         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 4        | 10.95         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 20       | 10.85         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 18       | 10.57         |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 10       | 10.06         |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N  | 2        | 9.91          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 5        | 9.86          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N  | 16       | 9.73          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N | 16       | 9.68          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N | 15       | 9.63          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 13       | 9.38          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N | 15       | 9.37          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 7        | 9.3           |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N | 3        | 9.23          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA | 1:68:A:GLY:C  | 17       | 9.21          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C  | 1:39:A:GLU:N  | 19       | 9.08          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 9        | 9.07          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 17       | 8.95          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 11       | 8.81          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 5        | 8.67          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 1        | 8.46          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 19       | 8.45          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 9        | 8.31          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 10       | 8.25          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 1        | 8.24          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 5        | 8.23          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 2        | 8.17          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 12       | 8.16          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 6        | 8.14          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 3        | 8.05          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 7        | 7.96          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 13       | 7.87          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 2        | 7.82          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 7        | 7.76          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 6        | 7.74          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 9        | 7.67          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 15       | 7.62          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 14       | 7.56          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 12       | 7.41          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 10       | 7.37          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 12       | 7.35          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 14       | 7.33          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 20       | 7.26          |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 13       | 7.1           |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 11       | 7.08          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 18       | 6.95          |
| (1,26)  | 1:14:A:LEU:N  | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C   | 1:15:A:GLY:N  | 12       | 6.84          |
| (1,118) | 1:67:A:THR:C  | 1:68:A:GLY:N   | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C  | 8        | 6.83          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 18       | 6.75          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 4        | 6.67          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 3        | 6.67          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 20       | 6.57          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 3        | 6.55          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 19       | 6.44          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 6        | 6.38          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 17       | 6.37          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 2        | 6.32          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 5        | 6.29          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 1        | 6.24          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 7        | 6.24          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 16       | 6.21          |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 10       | 6.18          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 4        | 6.16          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 6        | 6.12          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 4        | 6.11          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 19       | 6.07          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 4        | 6.06          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 13       | 6.0           |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 18       | 5.97          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 10       | 5.9           |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 8        | 5.87          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 11       | 5.84          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 17       | 5.82          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 6        | 5.8           |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 14       | 5.8           |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 20       | 5.79          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 2        | 5.78          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 3        | 5.76          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 3        | 5.73          |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 3        | 5.71          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 5        | 5.7           |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 12       | 5.69          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 20       | 5.66          |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 13       | 5.66          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 18       | 5.63          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 16       | 5.61          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 1        | 5.59          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 18       | 5.59          |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 11       | 5.56          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 18       | 5.55          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 18       | 5.53          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 1        | 5.51          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 3        | 5.48          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 5        | 5.45          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 8        | 5.44          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 3        | 5.43          |
| (1,127) | 1:72:A:GLU:N  | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C   | 1:73:A:ASN:N  | 11       | 5.4           |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 15       | 5.37          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 18       | 5.36          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 2        | 5.34          |
| (1,20)  | 1:11:A:LEU:N  | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C   | 1:12:A:ALA:N  | 6        | 5.34          |
| (1,234) | 1:133:A:GLU:N | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C  | 1:134:A:CYS:N | 9        | 5.33          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 20       | 5.32          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 17       | 5.25          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 1        | 5.25          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 14       | 5.24          |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 18       | 5.24          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 11       | 5.23          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 12       | 5.23          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 15       | 5.22          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 4        | 5.21          |
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 17       | 5.2           |
| (1,67)  | 1:41:A:GLY:C  | 1:42:A:LYS:N   | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C  | 8        | 5.18          |
| (1,69)  | 1:42:A:LYS:C  | 1:43:A:GLU:N   | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C  | 18       | 5.1           |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 4        | 5.09          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 8        | 5.07          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 16       | 5.04          |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 12       | 5.03          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 7        | 5.02          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 5        | 5.01          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 20       | 4.99          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 2        | 4.97          |
| (1,160) | 1:88:A:LEU:C  | 1:89:A:GLU:N   | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C  | 6        | 4.95          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 9        | 4.94          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 13       | 4.9           |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 15       | 4.9           |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 1        | 4.9           |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 13       | 4.9           |
| (1,93)  | 1:55:A:ARG:N  | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C   | 1:56:A:GLU:N  | 5        | 4.89          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 5        | 4.89          |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 9        | 4.87          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 8        | 4.86          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 1        | 4.86          |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 16       | 4.86          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 16       | 4.85          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 1        | 4.84          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 6        | 4.84          |
| (1,238) | 1:135:A:LEU:N | 1:135:A:LEU:CA | 1:135:A:LEU:C  | 1:136:A:GLU:N | 20       | 4.83          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 2        | 4.8           |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 13       | 4.79          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 14       | 4.79          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 5        | 4.77          |
| (1,212) | 1:115:A:SER:N | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C  | 1:116:A:TYR:N | 6        | 4.73          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 13       | 4.73          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 12       | 4.71          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 15       | 4.69          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 3        | 4.69          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 3        | 4.67          |
| (1,177) | 1:97:A:LYS:N  | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C   | 1:98:A:LYS:N  | 19       | 4.66          |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 5        | 4.66          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 1        | 4.66          |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 17       | 4.65          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 18       | 4.65          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 4        | 4.64          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 1        | 4.62          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 9        | 4.62          |
| (1,101) | 1:59:A:GLU:N  | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C   | 1:60:A:ALA:N  | 16       | 4.62          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 15       | 4.61          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 14       | 4.61          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 12       | 4.59          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 9        | 4.57          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 11       | 4.57          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 6        | 4.48          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 14       | 4.47          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 12       | 4.47          |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 11       | 4.45          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 10       | 4.43          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 19       | 4.42          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 17       | 4.39          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,109) | 1:63:A:GLN:N  | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C   | 1:64:A:LEU:N  | 4        | 4.39          |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 17       | 4.33          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 2        | 4.33          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 12       | 4.3           |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 3        | 4.3           |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 9        | 4.29          |
| (1,109) | 1:63:A:GLN:N  | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C   | 1:64:A:LEU:N  | 14       | 4.29          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 11       | 4.28          |
| (1,231) | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N  | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 15       | 4.28          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 3        | 4.26          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 5        | 4.25          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 8        | 4.25          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 11       | 4.25          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 11       | 4.25          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 8        | 4.25          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 20       | 4.24          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 15       | 4.23          |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 18       | 4.22          |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 20       | 4.22          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 6        | 4.21          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 14       | 4.2           |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 13       | 4.2           |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 8        | 4.2           |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 8        | 4.19          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 1        | 4.18          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 3        | 4.17          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 16       | 4.17          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 1        | 4.16          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 5        | 4.12          |
| (1,240) | 1:136:A:GLU:N | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C  | 1:137:A:LYS:N | 2        | 4.12          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 11       | 4.12          |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 11       | 4.1           |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 19       | 4.1           |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 16       | 4.09          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 2        | 4.09          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 9        | 4.09          |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 2        | 4.07          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 5        | 4.07          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 11       | 4.07          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 7        | 4.06          |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 20       | 4.05          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 4        | 4.04          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 13       | 4.03          |
| (1,234) | 1:133:A:GLU:N | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C  | 1:134:A:CYS:N | 20       | 4.02          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 3        | 4.01          |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 14       | 4.0           |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 3        | 4.0           |
| (1,217) | 1:117:A:GLU:C | 1:118:A:GLU:N  | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C | 1        | 3.99          |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 5        | 3.96          |
| (1,69)  | 1:42:A:LYS:C  | 1:43:A:GLU:N   | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C  | 9        | 3.95          |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 19       | 3.94          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 1        | 3.94          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 17       | 3.94          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 13       | 3.93          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 20       | 3.93          |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 5        | 3.91          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 5        | 3.9           |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 2        | 3.89          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 5        | 3.89          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 15       | 3.89          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 4        | 3.88          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 8        | 3.88          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 6        | 3.88          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 5        | 3.88          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 5        | 3.87          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 9        | 3.86          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 9        | 3.84          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 14       | 3.84          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 13       | 3.84          |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 14       | 3.84          |
| (1,88)  | 1:52:A:THR:N  | 1:52:A:THR:CA  | 1:52:A:THR:C   | 1:53:A:ASP:N  | 20       | 3.84          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 10       | 3.83          |
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 19       | 3.83          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 6        | 3.83          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 4        | 3.83          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 4        | 3.82          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 9        | 3.82          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 2        | 3.81          |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 6        | 3.8           |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 16       | 3.8           |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 19       | 3.8           |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 18       | 3.8           |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 14       | 3.8           |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 11       | 3.8           |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 12       | 3.79          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 13       | 3.78          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 5        | 3.76          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 19       | 3.76          |
| (1,164) | 1:90:A:CYS:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 6        | 3.76          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 10       | 3.75          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 9        | 3.75          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 1        | 3.74          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 9        | 3.74          |
| (1,168) | 1:92:A:ILE:C  | 1:93:A:GLU:N   | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C  | 6        | 3.73          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 6        | 3.72          |
| (1,218) | 1:118:A:GLU:N | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C  | 1:119:A:ILE:N | 6        | 3.71          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 20       | 3.71          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 8        | 3.71          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 10       | 3.71          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 15       | 3.7           |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 5        | 3.7           |
| (1,242) | 1:137:A:LYS:N | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C  | 1:138:A:ALA:N | 6        | 3.68          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 5        | 3.67          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 8        | 3.66          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 18       | 3.66          |
| (1,4)   | 1:3:A:MET:N   | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C    | 1:4:A:GLU:N   | 17       | 3.66          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 20       | 3.65          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 19       | 3.65          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 19       | 3.65          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 1        | 3.64          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 13       | 3.64          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 13       | 3.63          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 4        | 3.63          |
| (1,240) | 1:136:A:GLU:N | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C  | 1:137:A:LYS:N | 15       | 3.62          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 7        | 3.62          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 17       | 3.61          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 14       | 3.61          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 17       | 3.6           |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 17       | 3.6           |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 18       | 3.59          |
| (1,81)  | 1:48:A:ILE:C  | 1:49:A:LEU:N   | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C  | 9        | 3.59          |
| (1,209) | 1:113:A:LYS:C | 1:114:A:MET:N  | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C | 20       | 3.58          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 12       | 3.58          |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 20       | 3.58          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 2        | 3.57          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 8        | 3.57          |
| (1,180) | 1:98:A:LYS:C  | 1:99:A:TYR:N   | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C  | 17       | 3.56          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 11       | 3.56          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 8        | 3.56          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 11       | 3.54          |
| (1,221) | 1:119:A:ILE:C | 1:120:A:LEU:N  | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C | 19       | 3.54          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 15       | 3.54          |
| (1,23)  | 1:12:A:ALA:C  | 1:13:A:TYR:N   | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C  | 8        | 3.54          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 2        | 3.53          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 3        | 3.53          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 5        | 3.52          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 20       | 3.52          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 17       | 3.52          |
| (1,135) | 1:76:A:ALA:N  | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C   | 1:77:A:ALA:N  | 14       | 3.52          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 6        | 3.52          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 12       | 3.52          |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 10       | 3.52          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 9        | 3.51          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 5        | 3.51          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 17       | 3.5           |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 7        | 3.5           |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 13       | 3.5           |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 6        | 3.48          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 4        | 3.48          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 12       | 3.48          |
| (1,234) | 1:133:A:GLU:N | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C  | 1:134:A:CYS:N | 12       | 3.47          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 5        | 3.47          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 15       | 3.47          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 19       | 3.47          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 2        | 3.46          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 3        | 3.44          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 1        | 3.43          |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 6        | 3.42          |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 14       | 3.42          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 1        | 3.42          |
| (1,192) | 1:105:A:SER:N | 1:105:A:SER:CA | 1:105:A:SER:C  | 1:106:A:LYS:N | 10       | 3.41          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 1        | 3.41          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 9        | 3.41          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 19       | 3.4           |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 10       | 3.4           |
| (1,240) | 1:136:A:GLU:N | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C  | 1:137:A:LYS:N | 7        | 3.39          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 7        | 3.39          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 9        | 3.38          |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 2        | 3.38          |
| (1,93)  | 1:55:A:ARG:N  | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C   | 1:56:A:GLU:N  | 12       | 3.36          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 18       | 3.35          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 5        | 3.35          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 8        | 3.34          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 13       | 3.34          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 12       | 3.34          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 4        | 3.34          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 16       | 3.33          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 20       | 3.33          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 20       | 3.33          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 5        | 3.32          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 15       | 3.32          |
| (1,93)  | 1:55:A:ARG:N  | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C   | 1:56:A:GLU:N  | 9        | 3.32          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 20       | 3.32          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 18       | 3.31          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 19       | 3.3           |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 8        | 3.3           |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 5        | 3.3           |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 20       | 3.3           |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 4        | 3.3           |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 18       | 3.3           |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 19       | 3.3           |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 14       | 3.29          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 1        | 3.29          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 13       | 3.29          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 8        | 3.29          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 5        | 3.28          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 2        | 3.27          |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ILE:N  | 9        | 3.27          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 19       | 3.27          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 20       | 3.26          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 20       | 3.26          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 12       | 3.26          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 20       | 3.25          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 9        | 3.25          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 20       | 3.24          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 18       | 3.23          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 3        | 3.23          |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 1        | 3.22          |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 19       | 3.21          |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 13       | 3.21          |
| (1,101) | 1:59:A:GLU:N  | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C   | 1:60:A:ALA:N  | 18       | 3.21          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 15       | 3.21          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 20       | 3.21          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 17       | 3.21          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 11       | 3.2           |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 14       | 3.2           |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 16       | 3.19          |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 17       | 3.19          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 8        | 3.19          |
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 3        | 3.19          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 8        | 3.18          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 14       | 3.18          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 4        | 3.18          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 8        | 3.17          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 13       | 3.17          |
| (1,113) | 1:65:A:ALA:N  | 1:65:A:ALA:CA  | 1:65:A:ALA:C   | 1:66:A:GLU:N  | 2        | 3.17          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 7        | 3.16          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 6        | 3.16          |
| (1,71)  | 1:43:A:GLU:C  | 1:44:A:LEU:N   | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C  | 5        | 3.16          |
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 14       | 3.16          |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 9        | 3.15          |
| (1,233) | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:GLU:N  | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C | 6        | 3.15          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 19       | 3.15          |
| (1,192) | 1:105:A:SER:N | 1:105:A:SER:CA | 1:105:A:SER:C  | 1:106:A:LYS:N | 19       | 3.15          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 14       | 3.15          |
| (1,253) | 1:142:A:VAL:C | 1:143:A:LYS:N  | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C | 12       | 3.14          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 13       | 3.14          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 3        | 3.14          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 5        | 3.14          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 13       | 3.13          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 17       | 3.12          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 2        | 3.11          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 17       | 3.11          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 13       | 3.11          |
| (1,85)  | 1:50:A:GLU:C  | 1:51:A:SER:N   | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C  | 16       | 3.11          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 16       | 3.11          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 1        | 3.1           |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 17       | 3.1           |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 16       | 3.1           |
| (1,154) | 1:85:A:ARG:C  | 1:86:A:GLU:N   | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C  | 5        | 3.1           |
| (1,71)  | 1:43:A:GLU:C  | 1:44:A:LEU:N   | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C  | 7        | 3.1           |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 19       | 3.1           |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 2        | 3.1           |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 19       | 3.09          |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 20       | 3.09          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,101) | 1:59:A:GLU:N  | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C   | 1:60:A:ALA:N  | 19       | 3.09          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 1        | 3.09          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 20       | 3.08          |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 10       | 3.08          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 1        | 3.08          |
| (1,128) | 1:72:A:GLU:C  | 1:73:A:ASN:N   | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C  | 5        | 3.08          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 14       | 3.08          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 3        | 3.07          |
| (1,177) | 1:97:A:LYS:N  | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C   | 1:98:A:LYS:N  | 20       | 3.07          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 12       | 3.07          |
| (1,79)  | 1:47:A:LYS:C  | 1:48:A:ILE:N   | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C  | 16       | 3.06          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 5        | 3.06          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 2        | 3.06          |
| (1,240) | 1:136:A:GLU:N | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C  | 1:137:A:LYS:N | 14       | 3.05          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 4        | 3.05          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 18       | 3.04          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 8        | 3.03          |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 13       | 3.03          |
| (1,173) | 1:95:A:ILE:N  | 1:95:A:ILE:CA  | 1:95:A:ILE:C   | 1:96:A:LEU:N  | 8        | 3.03          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 19       | 3.03          |
| (1,63)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:VAL:N   | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C  | 8        | 3.03          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 11       | 3.02          |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 3        | 3.01          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 15       | 3.01          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 4        | 3.0           |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 10       | 3.0           |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 20       | 3.0           |
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 10       | 2.99          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 15       | 2.97          |
| (1,127) | 1:72:A:GLU:N  | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C   | 1:73:A:ASN:N  | 15       | 2.97          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 7        | 2.97          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 18       | 2.96          |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 14       | 2.95          |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 14       | 2.95          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 17       | 2.95          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 14       | 2.94          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 5        | 2.94          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 10       | 2.94          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 9        | 2.93          |
| (1,8)   | 1:5:A:LYS:N   | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C    | 1:6:A:LYS:N   | 8        | 2.93          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 8        | 2.92          |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 4        | 2.92          |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 17       | 2.92          |
| (1,200) | 1:109:A:GLU:N | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C  | 1:110:A:ALA:N | 16       | 2.91          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 13       | 2.9           |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 17       | 2.89          |
| (1,101) | 1:59:A:GLU:N  | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C   | 1:60:A:ALA:N  | 10       | 2.89          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 7        | 2.89          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 2        | 2.89          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 20       | 2.89          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 10       | 2.88          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 15       | 2.88          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 15       | 2.88          |
| (1,128) | 1:72:A:GLU:C  | 1:73:A:ASN:N   | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C  | 2        | 2.88          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 2        | 2.88          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 8        | 2.87          |
| (1,2)   | 1:2:A:SER:N   | 1:2:A:SER:CA   | 1:2:A:SER:C    | 1:3:A:MET:N   | 12       | 2.87          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 16       | 2.86          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 17       | 2.86          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 3        | 2.86          |
| (1,221) | 1:119:A:ILE:C | 1:120:A:LEU:N  | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C | 3        | 2.85          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 3        | 2.85          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 12       | 2.85          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 18       | 2.84          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 17       | 2.84          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 8        | 2.83          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 14       | 2.83          |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ILE:N  | 19       | 2.83          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 6        | 2.82          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 5        | 2.82          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 18       | 2.82          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 11       | 2.82          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 18       | 2.82          |
| (1,217) | 1:117:A:GLU:C | 1:118:A:GLU:N  | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C | 12       | 2.81          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 18       | 2.81          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 10       | 2.81          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 2        | 2.81          |
| (1,7)   | 1:4:A:GLU:C   | 1:5:A:LYS:N    | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C   | 8        | 2.81          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 7        | 2.8           |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 3        | 2.8           |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 5        | 2.8           |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 16       | 2.79          |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 8        | 2.79          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 11       | 2.79          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 20       | 2.79          |
| (1,225) | 1:121:A:LYS:C | 1:122:A:ASN:N  | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C | 1        | 2.78          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 15       | 2.78          |
| (1,143) | 1:80:A:LEU:N  | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C   | 1:81:A:MET:N  | 16       | 2.78          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 10       | 2.78          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 3        | 2.78          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 3        | 2.78          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 5        | 2.78          |
| (1,10)  | 1:6:A:LYS:N   | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C    | 1:7:A:LEU:N   | 19       | 2.78          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 17       | 2.77          |
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 15       | 2.77          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 15       | 2.77          |
| (1,135) | 1:76:A:ALA:N  | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C   | 1:77:A:ALA:N  | 2        | 2.77          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 14       | 2.76          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 15       | 2.76          |
| (1,221) | 1:119:A:ILE:C | 1:120:A:LEU:N  | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C | 4        | 2.76          |
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 9        | 2.76          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 15       | 2.76          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 1        | 2.76          |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 9        | 2.75          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 19       | 2.75          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 14       | 2.75          |
| (1,269) | 1:150:A:LEU:C | 1:151:A:ALA:N  | 1:151:A:ALA:CA | 1:151:A:ALA:C | 8        | 2.74          |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 3        | 2.74          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 4        | 2.74          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 19       | 2.73          |
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 6        | 2.73          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 18       | 2.73          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 17       | 2.72          |
| (1,247) | 1:139:A:ARG:C | 1:140:A:GLU:N  | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C | 2        | 2.72          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 11       | 2.72          |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 6        | 2.72          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 20       | 2.72          |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 12       | 2.71          |
| (1,113) | 1:65:A:ALA:N  | 1:65:A:ALA:CA  | 1:65:A:ALA:C   | 1:66:A:GLU:N  | 12       | 2.71          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 20       | 2.71          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 19       | 2.71          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 12       | 2.7           |
| (1,132) | 1:74:A:ARG:C  | 1:75:A:GLU:N   | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C  | 3        | 2.7           |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 4        | 2.7           |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 15       | 2.7           |
| (1,68)  | 1:42:A:LYS:N  | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C   | 1:43:A:GLU:N  | 8        | 2.69          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 18       | 2.69          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 16       | 2.68          |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 11       | 2.68          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 4        | 2.68          |
| (1,63)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:VAL:N   | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C  | 2        | 2.68          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 6        | 2.67          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 19       | 2.67          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 11       | 2.67          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 16       | 2.67          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 20       | 2.66          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 12       | 2.66          |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 14       | 2.66          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 7        | 2.66          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 9        | 2.66          |
| (1,23)  | 1:12:A:ALA:C  | 1:13:A:TYR:N   | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C  | 6        | 2.66          |
| (1,23)  | 1:12:A:ALA:C  | 1:13:A:TYR:N   | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C  | 12       | 2.66          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 10       | 2.65          |
| (1,142) | 1:79:A:GLU:C  | 1:80:A:LEU:N   | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C  | 5        | 2.65          |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 16       | 2.65          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 8        | 2.65          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 14       | 2.65          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 13       | 2.64          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 10       | 2.64          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 13       | 2.64          |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 8        | 2.63          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 15       | 2.63          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 8        | 2.63          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 10       | 2.63          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 1        | 2.62          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 1        | 2.62          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 5        | 2.62          |
| (1,9)   | 1:5:A:LYS:C   | 1:6:A:LYS:N    | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C   | 19       | 2.62          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 10       | 2.61          |
| (1,231) | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N  | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 6        | 2.61          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 12       | 2.61          |
| (1,227) | 1:129:A:GLU:C | 1:130:A:VAL:N  | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C | 4        | 2.61          |
| (1,213) | 1:115:A:SER:C | 1:116:A:TYR:N  | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C | 15       | 2.61          |
| (1,109) | 1:63:A:GLN:N  | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C   | 1:64:A:LEU:N  | 12       | 2.61          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 5        | 2.61          |
| (1,188) | 1:103:A:ASP:N | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C  | 1:104:A:VAL:N | 3        | 2.6           |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 6        | 2.6           |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 3        | 2.6           |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 15       | 2.6           |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 16       | 2.59          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 15       | 2.59          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 13       | 2.59          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 1        | 2.59          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 10       | 2.58          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 18       | 2.58          |
| (1,20)  | 1:11:A:LEU:N  | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C   | 1:12:A:ALA:N  | 15       | 2.58          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 9        | 2.57          |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 6        | 2.57          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 4        | 2.57          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 9        | 2.57          |
| (1,218) | 1:118:A:GLU:N | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C  | 1:119:A:ILE:N | 19       | 2.56          |
| (1,186) | 1:102:A:LEU:N | 1:102:A:LEU:CA | 1:102:A:LEU:C  | 1:103:A:ASP:N | 20       | 2.56          |
| (1,117) | 1:67:A:THR:N  | 1:67:A:THR:CA  | 1:67:A:THR:C   | 1:68:A:GLY:N  | 17       | 2.56          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 14       | 2.56          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 14       | 2.55          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 14       | 2.55          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 17       | 2.55          |
| (1,23)  | 1:12:A:ALA:C  | 1:13:A:TYR:N   | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C  | 17       | 2.55          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 6        | 2.54          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 20       | 2.54          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 11       | 2.53          |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 8        | 2.53          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 6        | 2.53          |
| (1,262) | 1:147:A:ALA:N | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C  | 1:148:A:LYS:N | 17       | 2.5           |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 1        | 2.5           |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 17       | 2.5           |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 3        | 2.5           |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 16       | 2.5           |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 18       | 2.5           |
| (1,192) | 1:105:A:SER:N | 1:105:A:SER:CA | 1:105:A:SER:C  | 1:106:A:LYS:N | 4        | 2.5           |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 20       | 2.5           |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 19       | 2.5           |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 7        | 2.5           |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 20       | 2.5           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 2        | 2.49          |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 18       | 2.49          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 20       | 2.49          |
| (1,127) | 1:72:A:GLU:N  | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C   | 1:73:A:ASN:N  | 9        | 2.48          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 4        | 2.48          |
| (1,94)  | 1:55:A:ARG:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 10       | 2.48          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 3        | 2.48          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 13       | 2.47          |
| (1,181) | 1:99:A:TYR:N  | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C   | 1:100:A:PRO:N | 7        | 2.47          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 15       | 2.47          |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 11       | 2.47          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 14       | 2.47          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 3        | 2.46          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 2        | 2.46          |
| (1,13)  | 1:7:A:LEU:C   | 1:8:A:GLU:N    | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C   | 4        | 2.46          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 17       | 2.45          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 6        | 2.45          |
| (1,29)  | 1:15:A:GLY:C  | 1:16:A:ILE:N   | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C  | 6        | 2.45          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 18       | 2.45          |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 4        | 2.44          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 10       | 2.43          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 16       | 2.43          |
| (1,135) | 1:76:A:ALA:N  | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C   | 1:77:A:ALA:N  | 20       | 2.42          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 1        | 2.42          |
| (1,244) | 1:138:A:ALA:N | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C  | 1:139:A:ARG:N | 17       | 2.41          |
| (1,236) | 1:134:A:CYS:N | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C  | 1:135:A:LEU:N | 13       | 2.41          |
| (1,168) | 1:92:A:ILE:C  | 1:93:A:GLU:N   | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C  | 15       | 2.41          |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 4        | 2.41          |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 18       | 2.41          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 13       | 2.41          |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 1        | 2.4           |
| (1,236) | 1:134:A:CYS:N | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C  | 1:135:A:LEU:N | 4        | 2.4           |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 7        | 2.4           |
| (1,89)  | 1:52:A:THR:C  | 1:53:A:ASP:N   | 1:53:A:ASP:CA  | 1:53:A:ASP:C  | 15       | 2.4           |
| (1,5)   | 1:3:A:MET:C   | 1:4:A:GLU:N    | 1:4:A:GLU:CA   | 1:4:A:GLU:C   | 17       | 2.4           |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 2        | 2.39          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 18       | 2.39          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 17       | 2.39          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 9        | 2.39          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 19       | 2.39          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 19       | 2.38          |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 3        | 2.38          |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 5        | 2.38          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 12       | 2.38          |
| (1,189) | 1:103:A:ASP:C | 1:104:A:VAL:N  | 1:104:A:VAL:CA | 1:104:A:VAL:C | 7        | 2.38          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 7        | 2.38          |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 14       | 2.38          |
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 19       | 2.38          |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 1        | 2.37          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 3        | 2.37          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 8        | 2.37          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,9)   | 1:5:A:LYS:C   | 1:6:A:LYS:N    | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C   | 6        | 2.37          |
| (1,261) | 1:146:A:ALA:C | 1:147:A:ALA:N  | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C | 13       | 2.36          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 14       | 2.36          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 16       | 2.36          |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 2        | 2.35          |
| (1,63)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:VAL:N   | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C  | 15       | 2.35          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 2        | 2.34          |
| (1,262) | 1:147:A:ALA:N | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C  | 1:148:A:LYS:N | 8        | 2.34          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 16       | 2.34          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 7        | 2.34          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 4        | 2.34          |
| (1,121) | 1:69:A:VAL:N  | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C   | 1:70:A:THR:N  | 9        | 2.34          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 19       | 2.34          |
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 2        | 2.34          |
| (1,230) | 1:131:A:ASN:N | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C  | 1:132:A:LYS:N | 10       | 2.33          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 13       | 2.33          |
| (1,200) | 1:109:A:GLU:N | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C  | 1:110:A:ALA:N | 18       | 2.33          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 12       | 2.33          |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 5        | 2.33          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 19       | 2.32          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 8        | 2.32          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 13       | 2.32          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 16       | 2.32          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 11       | 2.31          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 10       | 2.31          |
| (1,59)  | 1:30:A:ARG:C  | 1:31:A:VAL:N   | 1:31:A:VAL:CA  | 1:31:A:VAL:C  | 19       | 2.31          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 6        | 2.31          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 10       | 2.31          |
| (1,253) | 1:142:A:VAL:C | 1:143:A:LYS:N  | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C | 7        | 2.3           |
| (1,209) | 1:113:A:LYS:C | 1:114:A:MET:N  | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C | 9        | 2.3           |
| (1,88)  | 1:52:A:THR:N  | 1:52:A:THR:CA  | 1:52:A:THR:C   | 1:53:A:ASP:N  | 2        | 2.3           |
| (1,78)  | 1:47:A:LYS:N  | 1:47:A:LYS:CA  | 1:47:A:LYS:C   | 1:48:A:ILE:N  | 15       | 2.3           |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 8        | 2.3           |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 2        | 2.29          |
| (1,180) | 1:98:A:LYS:C  | 1:99:A:TYR:N   | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C  | 11       | 2.29          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 5        | 2.29          |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 11       | 2.29          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 18       | 2.28          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 15       | 2.28          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 13       | 2.28          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 10       | 2.28          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 9        | 2.28          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 3        | 2.27          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 8        | 2.27          |
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 16       | 2.27          |
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 20       | 2.27          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 13       | 2.27          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 19       | 2.27          |
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 15       | 2.27          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 13       | 2.26          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 6        | 2.26          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,71)  | 1:43:A:GLU:C  | 1:44:A:LEU:N   | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C  | 17       | 2.26          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 3        | 2.26          |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 14       | 2.25          |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 8        | 2.25          |
| (1,174) | 1:95:A:ILE:C  | 1:96:A:LEU:N   | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C  | 5        | 2.25          |
| (1,164) | 1:90:A:CYS:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 17       | 2.25          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 16       | 2.24          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 10       | 2.24          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 13       | 2.24          |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 18       | 2.24          |
| (1,57)  | 1:29:A:ALA:C  | 1:30:A:ARG:N   | 1:30:A:ARG:CA  | 1:30:A:ARG:C  | 14       | 2.24          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 10       | 2.24          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 9        | 2.23          |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 4        | 2.23          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 4        | 2.23          |
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 5        | 2.23          |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 1        | 2.23          |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 3        | 2.23          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 10       | 2.23          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 16       | 2.22          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 9        | 2.22          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 13       | 2.22          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 4        | 2.21          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 19       | 2.21          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 2        | 2.2           |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 5        | 2.2           |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 16       | 2.2           |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 15       | 2.2           |
| (1,54)  | 1:28:A:LEU:N  | 1:28:A:LEU:CA  | 1:28:A:LEU:C   | 1:29:A:ALA:N  | 20       | 2.2           |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 8        | 2.2           |
| (1,4)   | 1:3:A:MET:N   | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C    | 1:4:A:GLU:N   | 12       | 2.2           |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 19       | 2.19          |
| (1,227) | 1:129:A:GLU:C | 1:130:A:VAL:N  | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C | 9        | 2.19          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 8        | 2.19          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 20       | 2.18          |
| (1,202) | 1:110:A:ALA:N | 1:110:A:ALA:CA | 1:110:A:ALA:C  | 1:111:A:LEU:N | 20       | 2.18          |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 5        | 2.18          |
| (1,128) | 1:72:A:GLU:C  | 1:73:A:ASN:N   | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C  | 19       | 2.18          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 4        | 2.18          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 11       | 2.18          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 15       | 2.18          |
| (1,266) | 1:149:A:TYR:N | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C  | 1:150:A:LEU:N | 5        | 2.17          |
| (1,161) | 1:89:A:GLU:N  | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C   | 1:90:A:CYS:N  | 7        | 2.17          |
| (1,35)  | 1:18:A:LEU:C  | 1:19:A:GLU:N   | 1:19:A:GLU:CA  | 1:19:A:GLU:C  | 9        | 2.17          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 11       | 2.17          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 9        | 2.16          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 5        | 2.16          |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 16       | 2.16          |
| (1,149) | 1:83:A:ALA:N  | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C   | 1:84:A:VAL:N  | 13       | 2.16          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 1        | 2.16          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 8        | 2.16          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 16       | 2.16          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 2        | 2.16          |
| (1,63)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:VAL:N   | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C  | 14       | 2.16          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 11       | 2.16          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 4        | 2.15          |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 9        | 2.15          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 10       | 2.15          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 11       | 2.15          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 11       | 2.15          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 14       | 2.15          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 15       | 2.15          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 4        | 2.15          |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 17       | 2.14          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 17       | 2.14          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 7        | 2.14          |
| (1,180) | 1:98:A:LYS:C  | 1:99:A:TYR:N   | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C  | 20       | 2.14          |
| (1,144) | 1:80:A:LEU:C  | 1:81:A:MET:N   | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C  | 16       | 2.14          |
| (1,94)  | 1:55:A:ARG:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 9        | 2.14          |
| (1,46)  | 1:24:A:ILE:N  | 1:24:A:ILE:CA  | 1:24:A:ILE:C   | 1:25:A:ASP:N  | 19       | 2.14          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 3        | 2.14          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 5        | 2.13          |
| (1,218) | 1:118:A:GLU:N | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C  | 1:119:A:ILE:N | 10       | 2.13          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 3        | 2.13          |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 17       | 2.13          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 9        | 2.13          |
| (1,78)  | 1:47:A:LYS:N  | 1:47:A:LYS:CA  | 1:47:A:LYS:C   | 1:48:A:ILE:N  | 6        | 2.13          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 1        | 2.13          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 19       | 2.13          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 2        | 2.12          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 8        | 2.12          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 8        | 2.12          |
| (1,88)  | 1:52:A:THR:N  | 1:52:A:THR:CA  | 1:52:A:THR:C   | 1:53:A:ASP:N  | 14       | 2.12          |
| (1,69)  | 1:42:A:LYS:C  | 1:43:A:GLU:N   | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C  | 10       | 2.12          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 2        | 2.11          |
| (1,186) | 1:102:A:LEU:N | 1:102:A:LEU:CA | 1:102:A:LEU:C  | 1:103:A:ASP:N | 8        | 2.11          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 14       | 2.11          |
| (1,75)  | 1:45:A:VAL:C  | 1:46:A:LYS:N   | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C  | 15       | 2.11          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 2        | 2.11          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 15       | 2.11          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 12       | 2.1           |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 2        | 2.1           |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 8        | 2.1           |
| (1,113) | 1:65:A:ALA:N  | 1:65:A:ALA:CA  | 1:65:A:ALA:C   | 1:66:A:GLU:N  | 10       | 2.1           |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 3        | 2.1           |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 11       | 2.1           |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 11       | 2.1           |
| (1,267) | 1:149:A:TYR:C | 1:150:A:LEU:N  | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C | 5        | 2.09          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 10       | 2.09          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 5        | 2.09          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 19       | 2.09          |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 17       | 2.09          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,151) | 1:84:A:VAL:N  | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C   | 1:85:A:ARG:N  | 1        | 2.09          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 12       | 2.09          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 20       | 2.09          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 19       | 2.08          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 19       | 2.08          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 19       | 2.08          |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 2        | 2.08          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 10       | 2.08          |
| (1,236) | 1:134:A:CYS:N | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C  | 1:135:A:LEU:N | 20       | 2.07          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 6        | 2.07          |
| (1,4)   | 1:3:A:MET:N   | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C    | 1:4:A:GLU:N   | 9        | 2.07          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 3        | 2.06          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 12       | 2.06          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 5        | 2.06          |
| (1,71)  | 1:43:A:GLU:C  | 1:44:A:LEU:N   | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C  | 12       | 2.06          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 19       | 2.05          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 7        | 2.05          |
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 13       | 2.05          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 8        | 2.04          |
| (1,271) | 1:151:A:ALA:C | 1:152:A:ALA:N  | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C | 14       | 2.03          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 12       | 2.03          |
| (1,169) | 1:93:A:GLU:N  | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C   | 1:94:A:ASN:N  | 6        | 2.03          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 20       | 2.03          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 14       | 2.03          |
| (1,238) | 1:135:A:LEU:N | 1:135:A:LEU:CA | 1:135:A:LEU:C  | 1:136:A:GLU:N | 10       | 2.02          |
| (1,213) | 1:115:A:SER:C | 1:116:A:TYR:N  | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C | 4        | 2.02          |
| (1,192) | 1:105:A:SER:N | 1:105:A:SER:CA | 1:105:A:SER:C  | 1:106:A:LYS:N | 20       | 2.02          |
| (1,174) | 1:95:A:ILE:C  | 1:96:A:LEU:N   | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C  | 18       | 2.02          |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 15       | 2.02          |
| (1,128) | 1:72:A:GLU:C  | 1:73:A:ASN:N   | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C  | 14       | 2.02          |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 13       | 2.01          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 8        | 2.01          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 9        | 2.01          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 14       | 2.0           |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 14       | 2.0           |
| (1,84)  | 1:50:A:GLU:N  | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C   | 1:51:A:SER:N  | 16       | 2.0           |
| (1,69)  | 1:42:A:LYS:C  | 1:43:A:GLU:N   | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C  | 13       | 2.0           |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 2        | 2.0           |
| (1,9)   | 1:5:A:LYS:C   | 1:6:A:LYS:N    | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C   | 17       | 2.0           |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 6        | 1.99          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 17       | 1.99          |
| (1,135) | 1:76:A:ALA:N  | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C   | 1:77:A:ALA:N  | 17       | 1.99          |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 15       | 1.99          |
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 16       | 1.98          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 2        | 1.98          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 3        | 1.98          |
| (1,233) | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:GLU:N  | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C | 2        | 1.98          |
| (1,231) | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N  | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 11       | 1.98          |
| (1,177) | 1:97:A:LYS:N  | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C   | 1:98:A:LYS:N  | 2        | 1.98          |
| (1,148) | 1:82:A:LYS:C  | 1:83:A:ALA:N   | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C  | 11       | 1.98          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 20       | 1.98          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 4        | 1.97          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 3        | 1.97          |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 3        | 1.97          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 17       | 1.97          |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 15       | 1.97          |
| (1,206) | 1:112:A:ALA:N | 1:112:A:ALA:CA | 1:112:A:ALA:C  | 1:113:A:LYS:N | 2        | 1.96          |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 12       | 1.95          |
| (1,238) | 1:135:A:LEU:N | 1:135:A:LEU:CA | 1:135:A:LEU:C  | 1:136:A:GLU:N | 14       | 1.95          |
| (1,203) | 1:110:A:ALA:C | 1:111:A:LEU:N  | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C | 16       | 1.95          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 7        | 1.95          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 14       | 1.95          |
| (1,149) | 1:83:A:ALA:N  | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C   | 1:84:A:VAL:N  | 16       | 1.95          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 19       | 1.95          |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 1        | 1.95          |
| (1,61)  | 1:31:A:VAL:C  | 1:32:A:ASP:N   | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C  | 10       | 1.95          |
| (1,59)  | 1:30:A:ARG:C  | 1:31:A:VAL:N   | 1:31:A:VAL:CA  | 1:31:A:VAL:C  | 7        | 1.95          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 4        | 1.94          |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 19       | 1.94          |
| (1,264) | 1:148:A:LYS:N | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C  | 1:149:A:TYR:N | 20       | 1.93          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 5        | 1.93          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 18       | 1.93          |
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 1        | 1.93          |
| (1,207) | 1:112:A:ALA:C | 1:113:A:LYS:N  | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C | 10       | 1.93          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 17       | 1.93          |
| (1,148) | 1:82:A:LYS:C  | 1:83:A:ALA:N   | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C  | 6        | 1.93          |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 18       | 1.93          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 10       | 1.93          |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 15       | 1.93          |
| (1,67)  | 1:41:A:GLY:C  | 1:42:A:LYS:N   | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C  | 14       | 1.93          |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 14       | 1.93          |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 18       | 1.92          |
| (1,160) | 1:88:A:LEU:C  | 1:89:A:GLU:N   | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C  | 8        | 1.92          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 2        | 1.92          |
| (1,58)  | 1:30:A:ARG:N  | 1:30:A:ARG:CA  | 1:30:A:ARG:C   | 1:31:A:VAL:N  | 17       | 1.92          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 9        | 1.92          |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 18       | 1.92          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 7        | 1.92          |
| (1,4)   | 1:3:A:MET:N   | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C    | 1:4:A:GLU:N   | 16       | 1.92          |
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 13       | 1.91          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 10       | 1.91          |
| (1,194) | 1:106:A:LYS:N | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C  | 1:107:A:ALA:N | 11       | 1.91          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 7        | 1.91          |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 20       | 1.91          |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 1        | 1.91          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 14       | 1.91          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 10       | 1.9           |
| (1,209) | 1:113:A:LYS:C | 1:114:A:MET:N  | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C | 6        | 1.9           |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 8        | 1.9           |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 20       | 1.9           |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 8        | 1.9           |
| (1,135) | 1:76:A:ALA:N  | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C   | 1:77:A:ALA:N  | 6        | 1.9           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 16       | 1.9           |
| (1,94)  | 1:55:A:ARG:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 12       | 1.9           |
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 2        | 1.9           |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 19       | 1.9           |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 14       | 1.89          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 8        | 1.89          |
| (1,89)  | 1:52:A:THR:C  | 1:53:A:ASP:N   | 1:53:A:ASP:CA  | 1:53:A:ASP:C  | 17       | 1.89          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 13       | 1.89          |
| (1,63)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:VAL:N   | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C  | 20       | 1.89          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 5        | 1.89          |
| (1,8)   | 1:5:A:LYS:N   | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C    | 1:6:A:LYS:N   | 19       | 1.89          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 19       | 1.88          |
| (1,145) | 1:81:A:MET:N  | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C   | 1:82:A:LYS:N  | 13       | 1.88          |
| (1,137) | 1:77:A:ALA:N  | 1:77:A:ALA:CA  | 1:77:A:ALA:C   | 1:78:A:LYS:N  | 2        | 1.88          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 18       | 1.88          |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ILE:N  | 2        | 1.88          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 15       | 1.88          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 8        | 1.87          |
| (1,167) | 1:92:A:ILE:N  | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C   | 1:93:A:GLU:N  | 4        | 1.87          |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 6        | 1.87          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 14       | 1.87          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 10       | 1.87          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 3        | 1.87          |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 19       | 1.86          |
| (1,240) | 1:136:A:GLU:N | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C  | 1:137:A:LYS:N | 8        | 1.86          |
| (1,231) | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N  | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 8        | 1.86          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 20       | 1.86          |
| (1,163) | 1:90:A:CYS:N  | 1:90:A:CYS:CA  | 1:90:A:CYS:C   | 1:91:A:GLU:N  | 12       | 1.86          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 12       | 1.85          |
| (1,142) | 1:79:A:GLU:C  | 1:80:A:LEU:N   | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C  | 3        | 1.85          |
| (1,121) | 1:69:A:VAL:N  | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C   | 1:70:A:THR:N  | 1        | 1.85          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 14       | 1.85          |
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 8        | 1.84          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 2        | 1.84          |
| (1,113) | 1:65:A:ALA:N  | 1:65:A:ALA:CA  | 1:65:A:ALA:C   | 1:66:A:GLU:N  | 5        | 1.84          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 18       | 1.84          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 11       | 1.84          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 1        | 1.84          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 18       | 1.84          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 15       | 1.84          |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 4        | 1.84          |
| (1,234) | 1:133:A:GLU:N | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C  | 1:134:A:CYS:N | 19       | 1.83          |
| (1,169) | 1:93:A:GLU:N  | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C   | 1:94:A:ASN:N  | 1        | 1.83          |
| (1,149) | 1:83:A:ALA:N  | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C   | 1:84:A:VAL:N  | 19       | 1.83          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 12       | 1.83          |
| (1,11)  | 1:6:A:LYS:C   | 1:7:A:LEU:N    | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C   | 11       | 1.83          |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 16       | 1.82          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 7        | 1.82          |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 8        | 1.82          |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 7        | 1.81          |
| (1,169) | 1:93:A:GLU:N  | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C   | 1:94:A:ASN:N  | 4        | 1.81          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 13       | 1.81          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 7        | 1.81          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 15       | 1.8           |
| (1,244) | 1:138:A:ALA:N | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C  | 1:139:A:ARG:N | 8        | 1.8           |
| (1,183) | 1:100:A:PRO:C | 1:101:A:GLU:N  | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C | 7        | 1.8           |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 3        | 1.8           |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 15       | 1.8           |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 11       | 1.8           |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 9        | 1.8           |
| (1,10)  | 1:6:A:LYS:N   | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C    | 1:7:A:LEU:N   | 14       | 1.8           |
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 9        | 1.79          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 9        | 1.79          |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 16       | 1.79          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 4        | 1.79          |
| (1,26)  | 1:14:A:LEU:N  | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C   | 1:15:A:GLY:N  | 17       | 1.79          |
| (1,163) | 1:90:A:CYS:N  | 1:90:A:CYS:CA  | 1:90:A:CYS:C   | 1:91:A:GLU:N  | 17       | 1.78          |
| (1,93)  | 1:55:A:ARG:N  | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C   | 1:56:A:GLU:N  | 19       | 1.78          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 6        | 1.78          |
| (1,233) | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:GLU:N  | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C | 7        | 1.77          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 6        | 1.77          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 11       | 1.77          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 11       | 1.77          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 6        | 1.76          |
| (1,247) | 1:139:A:ARG:C | 1:140:A:GLU:N  | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C | 20       | 1.76          |
| (1,212) | 1:115:A:SER:N | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C  | 1:116:A:TYR:N | 13       | 1.76          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 2        | 1.76          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 5        | 1.76          |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 11       | 1.76          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 4        | 1.75          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 11       | 1.75          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 14       | 1.75          |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 10       | 1.74          |
| (1,185) | 1:101:A:GLU:C | 1:102:A:LEU:N  | 1:102:A:LEU:CA | 1:102:A:LEU:C | 8        | 1.74          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 12       | 1.74          |
| (1,169) | 1:93:A:GLU:N  | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C   | 1:94:A:ASN:N  | 12       | 1.74          |
| (1,151) | 1:84:A:VAL:N  | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C   | 1:85:A:ARG:N  | 18       | 1.74          |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 17       | 1.74          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 14       | 1.74          |
| (1,231) | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N  | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 16       | 1.73          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 1        | 1.73          |
| (1,173) | 1:95:A:ILE:N  | 1:95:A:ILE:CA  | 1:95:A:ILE:C   | 1:96:A:LEU:N  | 12       | 1.73          |
| (1,89)  | 1:52:A:THR:C  | 1:53:A:ASP:N   | 1:53:A:ASP:CA  | 1:53:A:ASP:C  | 1        | 1.73          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 7        | 1.73          |
| (1,264) | 1:148:A:LYS:N | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C  | 1:149:A:TYR:N | 17       | 1.72          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 17       | 1.72          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 20       | 1.72          |
| (1,100) | 1:58:A:ALA:C  | 1:59:A:GLU:N   | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C  | 10       | 1.72          |
| (1,81)  | 1:48:A:ILE:C  | 1:49:A:LEU:N   | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C  | 19       | 1.72          |
| (1,79)  | 1:47:A:LYS:C  | 1:48:A:ILE:N   | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C  | 7        | 1.72          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 9        | 1.72          |
| (1,3)   | 1:2:A:SER:C   | 1:3:A:MET:N    | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C   | 17       | 1.72          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 2        | 1.71          |
| (1,242) | 1:137:A:LYS:N | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C  | 1:138:A:ALA:N | 17       | 1.71          |
| (1,217) | 1:117:A:GLU:C | 1:118:A:GLU:N  | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C | 5        | 1.71          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 1        | 1.71          |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 12       | 1.71          |
| (1,140) | 1:78:A:LYS:C  | 1:79:A:GLU:N   | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C  | 16       | 1.71          |
| (1,81)  | 1:48:A:ILE:C  | 1:49:A:LEU:N   | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C  | 7        | 1.71          |
| (1,37)  | 1:19:A:GLU:C  | 1:20:A:SER:N   | 1:20:A:SER:CA  | 1:20:A:SER:C  | 11       | 1.71          |
| (1,27)  | 1:14:A:LEU:C  | 1:15:A:GLY:N   | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C  | 18       | 1.71          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 13       | 1.7           |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 3        | 1.7           |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 7        | 1.7           |
| (1,180) | 1:98:A:LYS:C  | 1:99:A:TYR:N   | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C  | 8        | 1.7           |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 15       | 1.7           |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 4        | 1.7           |
| (1,51)  | 1:26:A:ALA:C  | 1:27:A:ALA:N   | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C  | 9        | 1.7           |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 16       | 1.7           |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 16       | 1.69          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 10       | 1.69          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 16       | 1.69          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 13       | 1.69          |
| (1,217) | 1:117:A:GLU:C | 1:118:A:GLU:N  | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C | 2        | 1.69          |
| (1,212) | 1:115:A:SER:N | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C  | 1:116:A:TYR:N | 19       | 1.69          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 11       | 1.69          |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 1        | 1.69          |
| (1,160) | 1:88:A:LEU:C  | 1:89:A:GLU:N   | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C  | 7        | 1.69          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 7        | 1.69          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 19       | 1.69          |
| (1,67)  | 1:41:A:GLY:C  | 1:42:A:LYS:N   | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C  | 1        | 1.69          |
| (1,32)  | 1:17:A:LEU:N  | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C   | 1:18:A:LEU:N  | 16       | 1.69          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 8        | 1.69          |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 6        | 1.68          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 2        | 1.68          |
| (1,78)  | 1:47:A:LYS:N  | 1:47:A:LYS:CA  | 1:47:A:LYS:C   | 1:48:A:ILE:N  | 8        | 1.68          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 13       | 1.68          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 7        | 1.67          |
| (1,200) | 1:109:A:GLU:N | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C  | 1:110:A:ALA:N | 2        | 1.67          |
| (1,170) | 1:93:A:GLU:C  | 1:94:A:ASN:N   | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C  | 18       | 1.67          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 3        | 1.67          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 7        | 1.67          |
| (1,10)  | 1:6:A:LYS:N   | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C    | 1:7:A:LEU:N   | 17       | 1.67          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 15       | 1.66          |
| (1,264) | 1:148:A:LYS:N | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C  | 1:149:A:TYR:N | 16       | 1.66          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 13       | 1.66          |
| (1,238) | 1:135:A:LEU:N | 1:135:A:LEU:CA | 1:135:A:LEU:C  | 1:136:A:GLU:N | 19       | 1.66          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 9        | 1.66          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 19       | 1.66          |
| (1,174) | 1:95:A:ILE:C  | 1:96:A:LEU:N   | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C  | 12       | 1.66          |
| (1,41)  | 1:21:A:LEU:C  | 1:22:A:GLU:N   | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C  | 5        | 1.66          |
| (1,26)  | 1:14:A:LEU:N  | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C   | 1:15:A:GLY:N  | 7        | 1.66          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 8        | 1.65          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 16       | 1.65          |
| (1,227) | 1:129:A:GLU:C | 1:130:A:VAL:N  | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C | 5        | 1.65          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 19       | 1.65          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 13       | 1.65          |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 6        | 1.65          |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 16       | 1.65          |
| (1,101) | 1:59:A:GLU:N  | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C   | 1:60:A:ALA:N  | 14       | 1.65          |
| (1,59)  | 1:30:A:ARG:C  | 1:31:A:VAL:N   | 1:31:A:VAL:CA  | 1:31:A:VAL:C  | 8        | 1.65          |
| (1,46)  | 1:24:A:ILE:N  | 1:24:A:ILE:CA  | 1:24:A:ILE:C   | 1:25:A:ASP:N  | 18       | 1.65          |
| (1,262) | 1:147:A:ALA:N | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C  | 1:148:A:LYS:N | 2        | 1.64          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 8        | 1.64          |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 6        | 1.64          |
| (1,197) | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:LYS:N  | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C | 16       | 1.64          |
| (1,10)  | 1:6:A:LYS:N   | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C    | 1:7:A:LEU:N   | 4        | 1.64          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 13       | 1.63          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 4        | 1.63          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 18       | 1.63          |
| (1,212) | 1:115:A:SER:N | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C  | 1:116:A:TYR:N | 12       | 1.63          |
| (1,113) | 1:65:A:ALA:N  | 1:65:A:ALA:CA  | 1:65:A:ALA:C   | 1:66:A:GLU:N  | 11       | 1.63          |
| (1,111) | 1:64:A:LEU:N  | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C   | 1:65:A:ALA:N  | 10       | 1.63          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 17       | 1.63          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 9        | 1.63          |
| (1,239) | 1:135:A:LEU:C | 1:136:A:GLU:N  | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C | 7        | 1.62          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 9        | 1.62          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 5        | 1.62          |
| (1,228) | 1:130:A:VAL:N | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C  | 1:131:A:ASN:N | 3        | 1.62          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 17       | 1.62          |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 3        | 1.62          |
| (1,76)  | 1:46:A:LYS:N  | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C   | 1:47:A:LYS:N  | 9        | 1.62          |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 12       | 1.62          |
| (1,63)  | 1:34:A:GLU:C  | 1:35:A:VAL:N   | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C  | 7        | 1.62          |
| (1,267) | 1:149:A:TYR:C | 1:150:A:LEU:N  | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C | 6        | 1.61          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 18       | 1.61          |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 17       | 1.61          |
| (1,229) | 1:130:A:VAL:C | 1:131:A:ASN:N  | 1:131:A:ASN:CA | 1:131:A:ASN:C | 5        | 1.61          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 18       | 1.61          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 20       | 1.61          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 5        | 1.61          |
| (1,143) | 1:80:A:LEU:N  | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C   | 1:81:A:MET:N  | 7        | 1.61          |
| (1,143) | 1:80:A:LEU:N  | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C   | 1:81:A:MET:N  | 19       | 1.61          |
| (1,59)  | 1:30:A:ARG:C  | 1:31:A:VAL:N   | 1:31:A:VAL:CA  | 1:31:A:VAL:C  | 4        | 1.61          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 3        | 1.61          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 2        | 1.6           |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 8        | 1.6           |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 11       | 1.6           |
| (1,46)  | 1:24:A:ILE:N  | 1:24:A:ILE:CA  | 1:24:A:ILE:C   | 1:25:A:ASP:N  | 4        | 1.6           |
| (1,16)  | 1:9:A:ALA:N   | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C    | 1:10:A:ASN:N  | 12       | 1.6           |
| (1,174) | 1:95:A:ILE:C  | 1:96:A:LEU:N   | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C  | 14       | 1.58          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 4        | 1.58          |
| (1,135) | 1:76:A:ALA:N  | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C   | 1:77:A:ALA:N  | 13       | 1.58          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 4        | 1.58          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 18       | 1.58          |
| (1,109) | 1:63:A:GLN:N  | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C   | 1:64:A:LEU:N  | 11       | 1.58          |
| (1,83)  | 1:49:A:LEU:C  | 1:50:A:GLU:N   | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C  | 1        | 1.58          |
| (1,58)  | 1:30:A:ARG:N  | 1:30:A:ARG:CA  | 1:30:A:ARG:C   | 1:31:A:VAL:N  | 10       | 1.58          |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 19       | 1.57          |
| (1,239) | 1:135:A:LEU:C | 1:136:A:GLU:N  | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C | 15       | 1.57          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 16       | 1.57          |
| (1,233) | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:GLU:N  | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C | 17       | 1.57          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 4        | 1.57          |
| (1,172) | 1:94:A:ASN:C  | 1:95:A:ILE:N   | 1:95:A:ILE:CA  | 1:95:A:ILE:C  | 20       | 1.57          |
| (1,168) | 1:92:A:ILE:C  | 1:93:A:GLU:N   | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C  | 19       | 1.57          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 12       | 1.57          |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 2        | 1.57          |
| (1,148) | 1:82:A:LYS:C  | 1:83:A:ALA:N   | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C  | 12       | 1.57          |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 16       | 1.57          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 10       | 1.57          |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 20       | 1.57          |
| (1,59)  | 1:30:A:ARG:C  | 1:31:A:VAL:N   | 1:31:A:VAL:CA  | 1:31:A:VAL:C  | 9        | 1.57          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 10       | 1.57          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 18       | 1.56          |
| (1,254) | 1:143:A:LYS:N | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C  | 1:144:A:GLU:N | 7        | 1.56          |
| (1,243) | 1:137:A:LYS:C | 1:138:A:ALA:N  | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C | 17       | 1.56          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 9        | 1.56          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 8        | 1.56          |
| (1,209) | 1:113:A:LYS:C | 1:114:A:MET:N  | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C | 2        | 1.56          |
| (1,144) | 1:80:A:LEU:C  | 1:81:A:MET:N   | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C  | 11       | 1.56          |
| (1,137) | 1:77:A:ALA:N  | 1:77:A:ALA:CA  | 1:77:A:ALA:C   | 1:78:A:LYS:N  | 17       | 1.56          |
| (1,100) | 1:58:A:ALA:C  | 1:59:A:GLU:N   | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C  | 14       | 1.56          |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 3        | 1.56          |
| (1,88)  | 1:52:A:THR:N  | 1:52:A:THR:CA  | 1:52:A:THR:C   | 1:53:A:ASP:N  | 19       | 1.56          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 12       | 1.56          |
| (1,244) | 1:138:A:ALA:N | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C  | 1:139:A:ARG:N | 9        | 1.55          |
| (1,238) | 1:135:A:LEU:N | 1:135:A:LEU:CA | 1:135:A:LEU:C  | 1:136:A:GLU:N | 17       | 1.55          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 13       | 1.55          |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 2        | 1.55          |
| (1,75)  | 1:45:A:VAL:C  | 1:46:A:LYS:N   | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C  | 20       | 1.55          |
| (1,27)  | 1:14:A:LEU:C  | 1:15:A:GLY:N   | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C  | 4        | 1.55          |
| (1,19)  | 1:10:A:ASN:C  | 1:11:A:LEU:N   | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C  | 14       | 1.55          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 19       | 1.54          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 4        | 1.54          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 14       | 1.54          |
| (1,243) | 1:137:A:LYS:C | 1:138:A:ALA:N  | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C | 6        | 1.54          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 19       | 1.54          |
| (1,174) | 1:95:A:ILE:C  | 1:96:A:LEU:N   | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C  | 7        | 1.54          |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 16       | 1.54          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 12       | 1.54          |
| (1,13)  | 1:7:A:LEU:C   | 1:8:A:GLU:N    | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C   | 15       | 1.54          |
| (1,262) | 1:147:A:ALA:N | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C  | 1:148:A:LYS:N | 14       | 1.53          |
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 14       | 1.53          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 8        | 1.53          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 5        | 1.53          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,110) | 1:63:A:GLN:C  | 1:64:A:LEU:N   | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C  | 8        | 1.53          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 6        | 1.53          |
| (1,253) | 1:142:A:VAL:C | 1:143:A:LYS:N  | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C | 11       | 1.52          |
| (1,244) | 1:138:A:ALA:N | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C  | 1:139:A:ARG:N | 5        | 1.52          |
| (1,164) | 1:90:A:CYS:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 2        | 1.52          |
| (1,128) | 1:72:A:GLU:C  | 1:73:A:ASN:N   | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C  | 16       | 1.52          |
| (1,113) | 1:65:A:ALA:N  | 1:65:A:ALA:CA  | 1:65:A:ALA:C   | 1:66:A:GLU:N  | 8        | 1.52          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 9        | 1.52          |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ILE:N  | 5        | 1.52          |
| (1,27)  | 1:14:A:LEU:C  | 1:15:A:GLY:N   | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C  | 15       | 1.52          |
| (1,4)   | 1:3:A:MET:N   | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C    | 1:4:A:GLU:N   | 2        | 1.52          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 7        | 1.51          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 6        | 1.51          |
| (1,180) | 1:98:A:LYS:C  | 1:99:A:TYR:N   | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C  | 19       | 1.51          |
| (1,161) | 1:89:A:GLU:N  | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C   | 1:90:A:CYS:N  | 16       | 1.51          |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 3        | 1.51          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 10       | 1.51          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 6        | 1.51          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 17       | 1.51          |
| (1,84)  | 1:50:A:GLU:N  | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C   | 1:51:A:SER:N  | 1        | 1.51          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 11       | 1.51          |
| (1,37)  | 1:19:A:GLU:C  | 1:20:A:SER:N   | 1:20:A:SER:CA  | 1:20:A:SER:C  | 7        | 1.51          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 3        | 1.51          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 1        | 1.51          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 9        | 1.5           |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 18       | 1.5           |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 12       | 1.5           |
| (1,191) | 1:104:A:VAL:C | 1:105:A:SER:N  | 1:105:A:SER:CA | 1:105:A:SER:C | 5        | 1.5           |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 14       | 1.5           |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 9        | 1.5           |
| (1,54)  | 1:28:A:LEU:N  | 1:28:A:LEU:CA  | 1:28:A:LEU:C   | 1:29:A:ALA:N  | 8        | 1.5           |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 3        | 1.5           |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 16       | 1.5           |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 17       | 1.5           |
| (1,12)  | 1:7:A:LEU:N   | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C    | 1:8:A:GLU:N   | 5        | 1.5           |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 6        | 1.49          |
| (1,139) | 1:78:A:LYS:N  | 1:78:A:LYS:CA  | 1:78:A:LYS:C   | 1:79:A:GLU:N  | 15       | 1.49          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 10       | 1.49          |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 15       | 1.49          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 2        | 1.49          |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 2        | 1.48          |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 10       | 1.48          |
| (1,238) | 1:135:A:LEU:N | 1:135:A:LEU:CA | 1:135:A:LEU:C  | 1:136:A:GLU:N | 9        | 1.48          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 2        | 1.48          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 1        | 1.48          |
| (1,168) | 1:92:A:ILE:C  | 1:93:A:GLU:N   | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C  | 1        | 1.48          |
| (1,137) | 1:77:A:ALA:N  | 1:77:A:ALA:CA  | 1:77:A:ALA:C   | 1:78:A:LYS:N  | 20       | 1.48          |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 12       | 1.48          |
| (1,58)  | 1:30:A:ARG:N  | 1:30:A:ARG:CA  | 1:30:A:ARG:C   | 1:31:A:VAL:N  | 8        | 1.48          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 13       | 1.48          |
| (1,233) | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:GLU:N  | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C | 13       | 1.47          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 9        | 1.47          |
| (1,216) | 1:117:A:GLU:N | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C  | 1:118:A:GLU:N | 3        | 1.47          |
| (1,186) | 1:102:A:LEU:N | 1:102:A:LEU:CA | 1:102:A:LEU:C  | 1:103:A:ASP:N | 9        | 1.47          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 2        | 1.47          |
| (1,46)  | 1:24:A:ILE:N  | 1:24:A:ILE:CA  | 1:24:A:ILE:C   | 1:25:A:ASP:N  | 14       | 1.47          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 13       | 1.47          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 18       | 1.46          |
| (1,127) | 1:72:A:GLU:N  | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C   | 1:73:A:ASN:N  | 6        | 1.46          |
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 8        | 1.46          |
| (1,36)  | 1:19:A:GLU:N  | 1:19:A:GLU:CA  | 1:19:A:GLU:C   | 1:20:A:SER:N  | 1        | 1.46          |
| (1,261) | 1:146:A:ALA:C | 1:147:A:ALA:N  | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C | 10       | 1.45          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 14       | 1.45          |
| (1,216) | 1:117:A:GLU:N | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C  | 1:118:A:GLU:N | 8        | 1.45          |
| (1,211) | 1:114:A:MET:C | 1:115:A:SER:N  | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C | 8        | 1.45          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 13       | 1.45          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 13       | 1.45          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 15       | 1.45          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 19       | 1.45          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 2        | 1.45          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 6        | 1.45          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 9        | 1.45          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 17       | 1.44          |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 3        | 1.44          |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 4        | 1.44          |
| (1,27)  | 1:14:A:LEU:C  | 1:15:A:GLY:N   | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C  | 10       | 1.44          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 13       | 1.43          |
| (1,242) | 1:137:A:LYS:N | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C  | 1:138:A:ALA:N | 3        | 1.43          |
| (1,186) | 1:102:A:LEU:N | 1:102:A:LEU:CA | 1:102:A:LEU:C  | 1:103:A:ASP:N | 17       | 1.43          |
| (1,177) | 1:97:A:LYS:N  | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C   | 1:98:A:LYS:N  | 7        | 1.43          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 16       | 1.43          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 16       | 1.43          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 11       | 1.43          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 9        | 1.42          |
| (1,199) | 1:108:A:LYS:C | 1:109:A:GLU:N  | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C | 2        | 1.42          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 9        | 1.42          |
| (1,2)   | 1:2:A:SER:N   | 1:2:A:SER:CA   | 1:2:A:SER:C    | 1:3:A:MET:N   | 18       | 1.42          |
| (1,256) | 1:144:A:GLU:N | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C  | 1:145:A:ALA:N | 16       | 1.41          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 20       | 1.41          |
| (1,242) | 1:137:A:LYS:N | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C  | 1:138:A:ALA:N | 12       | 1.41          |
| (1,227) | 1:129:A:GLU:C | 1:130:A:VAL:N  | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C | 6        | 1.41          |
| (1,209) | 1:113:A:LYS:C | 1:114:A:MET:N  | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C | 10       | 1.41          |
| (1,184) | 1:101:A:GLU:N | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C  | 1:102:A:LEU:N | 14       | 1.41          |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 13       | 1.41          |
| (1,114) | 1:65:A:ALA:C  | 1:66:A:GLU:N   | 1:66:A:GLU:CA  | 1:66:A:GLU:C  | 9        | 1.41          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 1        | 1.41          |
| (1,20)  | 1:11:A:LEU:N  | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C   | 1:12:A:ALA:N  | 14       | 1.41          |
| (1,197) | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:LYS:N  | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C | 9        | 1.4           |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 17       | 1.4           |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 6        | 1.4           |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 9        | 1.4           |
| (1,121) | 1:69:A:VAL:N  | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C   | 1:70:A:THR:N  | 4        | 1.4           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 4        | 1.4           |
| (1,28)  | 1:15:A:GLY:N  | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C   | 1:16:A:ILE:N  | 5        | 1.4           |
| (1,253) | 1:142:A:VAL:C | 1:143:A:LYS:N  | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C | 16       | 1.39          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 5        | 1.39          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 9        | 1.39          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 12       | 1.39          |
| (1,88)  | 1:52:A:THR:N  | 1:52:A:THR:CA  | 1:52:A:THR:C   | 1:53:A:ASP:N  | 13       | 1.39          |
| (1,263) | 1:147:A:ALA:C | 1:148:A:LYS:N  | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C | 18       | 1.38          |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 17       | 1.38          |
| (1,86)  | 1:51:A:SER:N  | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C   | 1:52:A:THR:N  | 20       | 1.38          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 6        | 1.38          |
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 3        | 1.37          |
| (1,216) | 1:117:A:GLU:N | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C  | 1:118:A:GLU:N | 16       | 1.37          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 14       | 1.37          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 13       | 1.37          |
| (1,51)  | 1:26:A:ALA:C  | 1:27:A:ALA:N   | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C  | 20       | 1.37          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 15       | 1.37          |
| (1,9)   | 1:5:A:LYS:C   | 1:6:A:LYS:N    | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C   | 8        | 1.37          |
| (1,232) | 1:132:A:LYS:N | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C  | 1:133:A:GLU:N | 12       | 1.36          |
| (1,208) | 1:113:A:LYS:N | 1:113:A:LYS:CA | 1:113:A:LYS:C  | 1:114:A:MET:N | 2        | 1.36          |
| (1,161) | 1:89:A:GLU:N  | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C   | 1:90:A:CYS:N  | 19       | 1.36          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 19       | 1.36          |
| (1,129) | 1:73:A:ASN:N  | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C   | 1:74:A:ARG:N  | 13       | 1.36          |
| (1,120) | 1:68:A:GLY:C  | 1:69:A:VAL:N   | 1:69:A:VAL:CA  | 1:69:A:VAL:C  | 10       | 1.36          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 5        | 1.36          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 18       | 1.36          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 15       | 1.36          |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 17       | 1.36          |
| (1,264) | 1:148:A:LYS:N | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C  | 1:149:A:TYR:N | 4        | 1.35          |
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 13       | 1.35          |
| (1,182) | 1:100:A:PRO:N | 1:100:A:PRO:CA | 1:100:A:PRO:C  | 1:101:A:GLU:N | 8        | 1.35          |
| (1,180) | 1:98:A:LYS:C  | 1:99:A:TYR:N   | 1:99:A:TYR:CA  | 1:99:A:TYR:C  | 12       | 1.35          |
| (1,91)  | 1:54:A:PRO:N  | 1:54:A:PRO:CA  | 1:54:A:PRO:C   | 1:55:A:ARG:N  | 14       | 1.35          |
| (1,75)  | 1:45:A:VAL:C  | 1:46:A:LYS:N   | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C  | 6        | 1.35          |
| (1,72)  | 1:44:A:LEU:N  | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C   | 1:45:A:VAL:N  | 7        | 1.35          |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 1        | 1.35          |
| (1,13)  | 1:7:A:LEU:C   | 1:8:A:GLU:N    | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C   | 11       | 1.35          |
| (1,246) | 1:139:A:ARG:N | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C  | 1:140:A:GLU:N | 16       | 1.34          |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 11       | 1.34          |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 12       | 1.34          |
| (1,226) | 1:122:A:ASN:N | 1:122:A:ASN:CA | 1:122:A:ASN:C  | 1:123:A:ARG:N | 6        | 1.34          |
| (1,126) | 1:71:A:GLU:C  | 1:72:A:GLU:N   | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C  | 16       | 1.34          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 17       | 1.34          |
| (1,69)  | 1:42:A:LYS:C  | 1:43:A:GLU:N   | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C  | 8        | 1.34          |
| (1,58)  | 1:30:A:ARG:N  | 1:30:A:ARG:CA  | 1:30:A:ARG:C   | 1:31:A:VAL:N  | 14       | 1.34          |
| (1,42)  | 1:22:A:GLU:N  | 1:22:A:GLU:CA  | 1:22:A:GLU:C   | 1:23:A:THR:N  | 13       | 1.34          |
| (1,192) | 1:105:A:SER:N | 1:105:A:SER:CA | 1:105:A:SER:C  | 1:106:A:LYS:N | 8        | 1.33          |
| (1,174) | 1:95:A:ILE:C  | 1:96:A:LEU:N   | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C  | 19       | 1.33          |
| (1,164) | 1:90:A:CYS:C  | 1:91:A:GLU:N   | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C  | 5        | 1.33          |
| (1,151) | 1:84:A:VAL:N  | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C   | 1:85:A:ARG:N  | 10       | 1.33          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 8        | 1.33          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 10       | 1.33          |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 16       | 1.32          |
| (1,147) | 1:82:A:LYS:N  | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C   | 1:83:A:ALA:N  | 18       | 1.32          |
| (1,134) | 1:75:A:GLU:C  | 1:76:A:ALA:N   | 1:76:A:ALA:CA  | 1:76:A:ALA:C  | 16       | 1.32          |
| (1,109) | 1:63:A:GLN:N  | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C   | 1:64:A:LEU:N  | 1        | 1.32          |
| (1,87)  | 1:51:A:SER:C  | 1:52:A:THR:N   | 1:52:A:THR:CA  | 1:52:A:THR:C  | 16       | 1.32          |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 14       | 1.32          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 15       | 1.31          |
| (1,161) | 1:89:A:GLU:N  | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C   | 1:90:A:CYS:N  | 8        | 1.31          |
| (1,145) | 1:81:A:MET:N  | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C   | 1:82:A:LYS:N  | 10       | 1.31          |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 4        | 1.31          |
| (1,93)  | 1:55:A:ARG:N  | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C   | 1:56:A:GLU:N  | 16       | 1.31          |
| (1,64)  | 1:35:A:VAL:N  | 1:35:A:VAL:CA  | 1:35:A:VAL:C   | 1:36:A:THR:N  | 2        | 1.31          |
| (1,15)  | 1:8:A:GLU:C   | 1:9:A:ALA:N    | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C   | 16       | 1.31          |
| (1,204) | 1:111:A:LEU:N | 1:111:A:LEU:CA | 1:111:A:LEU:C  | 1:112:A:ALA:N | 18       | 1.3           |
| (1,202) | 1:110:A:ALA:N | 1:110:A:ALA:CA | 1:110:A:ALA:C  | 1:111:A:LEU:N | 18       | 1.3           |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 1        | 1.3           |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 12       | 1.3           |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 16       | 1.3           |
| (1,148) | 1:82:A:LYS:C  | 1:83:A:ALA:N   | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C  | 20       | 1.3           |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 19       | 1.3           |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 5        | 1.3           |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 7        | 1.3           |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 4        | 1.3           |
| (1,9)   | 1:5:A:LYS:C   | 1:6:A:LYS:N    | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C   | 3        | 1.3           |
| (1,7)   | 1:4:A:GLU:C   | 1:5:A:LYS:N    | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C   | 12       | 1.3           |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 7        | 1.29          |
| (1,146) | 1:81:A:MET:C  | 1:82:A:LYS:N   | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C  | 20       | 1.29          |
| (1,105) | 1:61:A:VAL:N  | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C   | 1:62:A:ALA:N  | 6        | 1.29          |
| (1,97)  | 1:57:A:ILE:N  | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C   | 1:58:A:ALA:N  | 7        | 1.29          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 6        | 1.29          |
| (1,241) | 1:136:A:GLU:C | 1:137:A:LYS:N  | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C | 8        | 1.28          |
| (1,217) | 1:117:A:GLU:C | 1:118:A:GLU:N  | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C | 13       | 1.28          |
| (1,210) | 1:114:A:MET:N | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C  | 1:115:A:SER:N | 11       | 1.28          |
| (1,200) | 1:109:A:GLU:N | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C  | 1:110:A:ALA:N | 15       | 1.28          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 5        | 1.28          |
| (1,168) | 1:92:A:ILE:C  | 1:93:A:GLU:N   | 1:93:A:GLU:CA  | 1:93:A:GLU:C  | 7        | 1.28          |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 1        | 1.28          |
| (1,109) | 1:63:A:GLN:N  | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C   | 1:64:A:LEU:N  | 6        | 1.28          |
| (1,101) | 1:59:A:GLU:N  | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C   | 1:60:A:ALA:N  | 5        | 1.28          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 7        | 1.28          |
| (1,8)   | 1:5:A:LYS:N   | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C    | 1:6:A:LYS:N   | 3        | 1.28          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 20       | 1.27          |
| (1,209) | 1:113:A:LYS:C | 1:114:A:MET:N  | 1:114:A:MET:CA | 1:114:A:MET:C | 19       | 1.27          |
| (1,165) | 1:91:A:GLU:N  | 1:91:A:GLU:CA  | 1:91:A:GLU:C   | 1:92:A:ILE:N  | 15       | 1.27          |
| (1,143) | 1:80:A:LEU:N  | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C   | 1:81:A:MET:N  | 20       | 1.27          |
| (1,7)   | 1:4:A:GLU:C   | 1:5:A:LYS:N    | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C   | 2        | 1.27          |
| (1,266) | 1:149:A:TYR:N | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C  | 1:150:A:LEU:N | 13       | 1.26          |
| (1,264) | 1:148:A:LYS:N | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C  | 1:149:A:TYR:N | 3        | 1.26          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 11       | 1.26          |
| (1,137) | 1:77:A:ALA:N  | 1:77:A:ALA:CA  | 1:77:A:ALA:C   | 1:78:A:LYS:N  | 6        | 1.26          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,59)  | 1:30:A:ARG:C  | 1:31:A:VAL:N   | 1:31:A:VAL:CA  | 1:31:A:VAL:C  | 2        | 1.26          |
| (1,56)  | 1:29:A:ALA:N  | 1:29:A:ALA:CA  | 1:29:A:ALA:C   | 1:30:A:ARG:N  | 7        | 1.26          |
| (1,31)  | 1:16:A:ILE:C  | 1:17:A:LEU:N   | 1:17:A:LEU:CA  | 1:17:A:LEU:C  | 12       | 1.26          |
| (1,26)  | 1:14:A:LEU:N  | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C   | 1:15:A:GLY:N  | 15       | 1.26          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 8        | 1.26          |
| (1,264) | 1:148:A:LYS:N | 1:148:A:LYS:CA | 1:148:A:LYS:C  | 1:149:A:TYR:N | 14       | 1.25          |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 15       | 1.25          |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 9        | 1.25          |
| (1,36)  | 1:19:A:GLU:N  | 1:19:A:GLU:CA  | 1:19:A:GLU:C   | 1:20:A:SER:N  | 2        | 1.25          |
| (1,18)  | 1:10:A:ASN:N  | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C   | 1:11:A:LEU:N  | 19       | 1.25          |
| (1,15)  | 1:8:A:GLU:C   | 1:9:A:ALA:N    | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C   | 5        | 1.25          |
| (1,7)   | 1:4:A:GLU:C   | 1:5:A:LYS:N    | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C   | 4        | 1.25          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 4        | 1.24          |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 9        | 1.24          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 15       | 1.24          |
| (1,93)  | 1:55:A:ARG:N  | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C   | 1:56:A:GLU:N  | 2        | 1.24          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 17       | 1.24          |
| (1,62)  | 1:32:A:ASP:N  | 1:32:A:ASP:CA  | 1:32:A:ASP:C   | 1:33:A:ALA:N  | 1        | 1.24          |
| (1,20)  | 1:11:A:LEU:N  | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C   | 1:12:A:ALA:N  | 1        | 1.24          |
| (1,4)   | 1:3:A:MET:N   | 1:3:A:MET:CA   | 1:3:A:MET:C    | 1:4:A:GLU:N   | 5        | 1.24          |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 17       | 1.23          |
| (1,146) | 1:81:A:MET:C  | 1:82:A:LYS:N   | 1:82:A:LYS:CA  | 1:82:A:LYS:C  | 1        | 1.23          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 20       | 1.23          |
| (1,94)  | 1:55:A:ARG:C  | 1:56:A:GLU:N   | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C  | 20       | 1.23          |
| (1,54)  | 1:28:A:LEU:N  | 1:28:A:LEU:CA  | 1:28:A:LEU:C   | 1:29:A:ALA:N  | 12       | 1.23          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 1        | 1.23          |
| (1,245) | 1:138:A:ALA:C | 1:139:A:ARG:N  | 1:139:A:ARG:CA | 1:139:A:ARG:C | 13       | 1.22          |
| (1,231) | 1:131:A:ASN:C | 1:132:A:LYS:N  | 1:132:A:LYS:CA | 1:132:A:LYS:C | 7        | 1.22          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 2        | 1.22          |
| (1,200) | 1:109:A:GLU:N | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C  | 1:110:A:ALA:N | 4        | 1.22          |
| (1,199) | 1:108:A:LYS:C | 1:109:A:GLU:N  | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C | 7        | 1.22          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 11       | 1.22          |
| (1,183) | 1:100:A:PRO:C | 1:101:A:GLU:N  | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C | 20       | 1.22          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 3        | 1.22          |
| (1,148) | 1:82:A:LYS:C  | 1:83:A:ALA:N   | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C  | 10       | 1.22          |
| (1,92)  | 1:54:A:PRO:C  | 1:55:A:ARG:N   | 1:55:A:ARG:CA  | 1:55:A:ARG:C  | 9        | 1.22          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 15       | 1.22          |
| (1,29)  | 1:15:A:GLY:C  | 1:16:A:ILE:N   | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C  | 4        | 1.22          |
| (1,28)  | 1:15:A:GLY:N  | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C   | 1:16:A:ILE:N  | 16       | 1.22          |
| (1,13)  | 1:7:A:LEU:C   | 1:8:A:GLU:N    | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C   | 7        | 1.22          |
| (1,221) | 1:119:A:ILE:C | 1:120:A:LEU:N  | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C | 18       | 1.21          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 11       | 1.21          |
| (1,197) | 1:107:A:ALA:C | 1:108:A:LYS:N  | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C | 2        | 1.21          |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 9        | 1.21          |
| (1,108) | 1:62:A:ALA:C  | 1:63:A:GLN:N   | 1:63:A:GLN:CA  | 1:63:A:GLN:C  | 18       | 1.21          |
| (1,272) | 1:152:A:ALA:N | 1:152:A:ALA:CA | 1:152:A:ALA:C  | 1:153:A:GLY:N | 5        | 1.2           |
| (1,212) | 1:115:A:SER:N | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C  | 1:116:A:TYR:N | 17       | 1.2           |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 19       | 1.2           |
| (1,110) | 1:63:A:GLN:C  | 1:64:A:LEU:N   | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C  | 17       | 1.2           |
| (1,47)  | 1:24:A:ILE:C  | 1:25:A:ASP:N   | 1:25:A:ASP:CA  | 1:25:A:ASP:C  | 5        | 1.2           |
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 12       | 1.19          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 6        | 1.19          |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 18       | 1.19          |
| (1,150) | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:VAL:N   | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C  | 2        | 1.19          |
| (1,27)  | 1:14:A:LEU:C  | 1:15:A:GLY:N   | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C  | 17       | 1.19          |
| (1,23)  | 1:12:A:ALA:C  | 1:13:A:TYR:N   | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C  | 16       | 1.19          |
| (1,14)  | 1:8:A:GLU:N   | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C    | 1:9:A:ALA:N   | 16       | 1.19          |
| (1,262) | 1:147:A:ALA:N | 1:147:A:ALA:CA | 1:147:A:ALA:C  | 1:148:A:LYS:N | 10       | 1.18          |
| (1,252) | 1:142:A:VAL:N | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C  | 1:143:A:LYS:N | 11       | 1.18          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 13       | 1.18          |
| (1,234) | 1:133:A:GLU:N | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C  | 1:134:A:CYS:N | 16       | 1.18          |
| (1,177) | 1:97:A:LYS:N  | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C   | 1:98:A:LYS:N  | 5        | 1.18          |
| (1,155) | 1:86:A:GLU:N  | 1:86:A:GLU:CA  | 1:86:A:GLU:C   | 1:87:A:LEU:N  | 3        | 1.18          |
| (1,138) | 1:77:A:ALA:C  | 1:78:A:LYS:N   | 1:78:A:LYS:CA  | 1:78:A:LYS:C  | 1        | 1.18          |
| (1,126) | 1:71:A:GLU:C  | 1:72:A:GLU:N   | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C  | 3        | 1.18          |
| (1,104) | 1:60:A:ALA:C  | 1:61:A:VAL:N   | 1:61:A:VAL:CA  | 1:61:A:VAL:C  | 2        | 1.18          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 5        | 1.18          |
| (1,38)  | 1:20:A:SER:N  | 1:20:A:SER:CA  | 1:20:A:SER:C   | 1:21:A:LEU:N  | 20       | 1.18          |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 8        | 1.18          |
| (1,23)  | 1:12:A:ALA:C  | 1:13:A:TYR:N   | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C  | 7        | 1.18          |
| (1,239) | 1:135:A:LEU:C | 1:136:A:GLU:N  | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C | 14       | 1.17          |
| (1,157) | 1:87:A:LEU:N  | 1:87:A:LEU:CA  | 1:87:A:LEU:C   | 1:88:A:LEU:N  | 8        | 1.17          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 9        | 1.17          |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 5        | 1.17          |
| (1,79)  | 1:47:A:LYS:C  | 1:48:A:ILE:N   | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C  | 11       | 1.17          |
| (1,73)  | 1:44:A:LEU:C  | 1:45:A:VAL:N   | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C  | 19       | 1.17          |
| (1,33)  | 1:17:A:LEU:C  | 1:18:A:LEU:N   | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C  | 4        | 1.17          |
| (1,13)  | 1:7:A:LEU:C   | 1:8:A:GLU:N    | 1:8:A:GLU:CA   | 1:8:A:GLU:C   | 1        | 1.17          |
| (1,11)  | 1:6:A:LYS:C   | 1:7:A:LEU:N    | 1:7:A:LEU:CA   | 1:7:A:LEU:C   | 18       | 1.17          |
| (1,260) | 1:146:A:ALA:N | 1:146:A:ALA:CA | 1:146:A:ALA:C  | 1:147:A:ALA:N | 7        | 1.16          |
| (1,214) | 1:116:A:TYR:N | 1:116:A:TYR:CA | 1:116:A:TYR:C  | 1:117:A:GLU:N | 5        | 1.16          |
| (1,212) | 1:115:A:SER:N | 1:115:A:SER:CA | 1:115:A:SER:C  | 1:116:A:TYR:N | 7        | 1.16          |
| (1,67)  | 1:41:A:GLY:C  | 1:42:A:LYS:N   | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C  | 20       | 1.16          |
| (1,30)  | 1:16:A:ILE:N  | 1:16:A:ILE:CA  | 1:16:A:ILE:C   | 1:17:A:LEU:N  | 13       | 1.16          |
| (1,200) | 1:109:A:GLU:N | 1:109:A:GLU:CA | 1:109:A:GLU:C  | 1:110:A:ALA:N | 1        | 1.15          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 17       | 1.15          |
| (1,80)  | 1:48:A:ILE:N  | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C   | 1:49:A:LEU:N  | 19       | 1.15          |
| (1,66)  | 1:38:A:GLU:N  | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C   | 1:39:A:GLU:N  | 1        | 1.15          |
| (1,54)  | 1:28:A:LEU:N  | 1:28:A:LEU:CA  | 1:28:A:LEU:C   | 1:29:A:ALA:N  | 4        | 1.15          |
| (1,10)  | 1:6:A:LYS:N   | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C    | 1:7:A:LEU:N   | 8        | 1.15          |
| (1,151) | 1:84:A:VAL:N  | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C   | 1:85:A:ARG:N  | 4        | 1.14          |
| (1,137) | 1:77:A:ALA:N  | 1:77:A:ALA:CA  | 1:77:A:ALA:C   | 1:78:A:LYS:N  | 14       | 1.14          |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 7        | 1.14          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 16       | 1.14          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 3        | 1.14          |
| (1,71)  | 1:43:A:GLU:C  | 1:44:A:LEU:N   | 1:44:A:LEU:CA  | 1:44:A:LEU:C  | 16       | 1.14          |
| (1,65)  | 1:37:A:LYS:C  | 1:38:A:GLU:N   | 1:38:A:GLU:CA  | 1:38:A:GLU:C  | 4        | 1.14          |
| (1,2)   | 1:2:A:SER:N   | 1:2:A:SER:CA   | 1:2:A:SER:C    | 1:3:A:MET:N   | 4        | 1.14          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 18       | 1.13          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 1        | 1.13          |
| (1,178) | 1:97:A:LYS:C  | 1:98:A:LYS:N   | 1:98:A:LYS:CA  | 1:98:A:LYS:C  | 7        | 1.13          |
| (1,160) | 1:88:A:LEU:C  | 1:89:A:GLU:N   | 1:89:A:GLU:CA  | 1:89:A:GLU:C  | 2        | 1.13          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,133) | 1:75:A:GLU:N  | 1:75:A:GLU:CA  | 1:75:A:GLU:C   | 1:76:A:ALA:N  | 20       | 1.13          |
| (1,127) | 1:72:A:GLU:N  | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C   | 1:73:A:ASN:N  | 4        | 1.13          |
| (1,99)  | 1:58:A:ALA:N  | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C   | 1:59:A:GLU:N  | 19       | 1.13          |
| (1,84)  | 1:50:A:GLU:N  | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C   | 1:51:A:SER:N  | 14       | 1.13          |
| (1,68)  | 1:42:A:LYS:N  | 1:42:A:LYS:CA  | 1:42:A:LYS:C   | 1:43:A:GLU:N  | 19       | 1.13          |
| (1,40)  | 1:21:A:LEU:N  | 1:21:A:LEU:CA  | 1:21:A:LEU:C   | 1:22:A:GLU:N  | 8        | 1.13          |
| (1,8)   | 1:5:A:LYS:N   | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C    | 1:6:A:LYS:N   | 10       | 1.13          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 12       | 1.12          |
| (1,257) | 1:144:A:GLU:C | 1:145:A:ALA:N  | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C | 5        | 1.12          |
| (1,249) | 1:140:A:GLU:C | 1:141:A:LYS:N  | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C | 18       | 1.12          |
| (1,248) | 1:140:A:GLU:N | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C  | 1:141:A:LYS:N | 15       | 1.12          |
| (1,218) | 1:118:A:GLU:N | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C  | 1:119:A:ILE:N | 1        | 1.12          |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 13       | 1.12          |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 19       | 1.12          |
| (1,98)  | 1:57:A:ILE:C  | 1:58:A:ALA:N   | 1:58:A:ALA:CA  | 1:58:A:ALA:C  | 6        | 1.12          |
| (1,83)  | 1:49:A:LEU:C  | 1:50:A:GLU:N   | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C  | 4        | 1.12          |
| (1,82)  | 1:49:A:LEU:N  | 1:49:A:LEU:CA  | 1:49:A:LEU:C   | 1:50:A:GLU:N  | 8        | 1.12          |
| (1,54)  | 1:28:A:LEU:N  | 1:28:A:LEU:CA  | 1:28:A:LEU:C   | 1:29:A:ALA:N  | 2        | 1.12          |
| (1,8)   | 1:5:A:LYS:N   | 1:5:A:LYS:CA   | 1:5:A:LYS:C    | 1:6:A:LYS:N   | 11       | 1.12          |
| (1,173) | 1:95:A:ILE:N  | 1:95:A:ILE:CA  | 1:95:A:ILE:C   | 1:96:A:LEU:N  | 14       | 1.11          |
| (1,124) | 1:70:A:THR:C  | 1:71:A:GLU:N   | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C  | 1        | 1.11          |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 6        | 1.11          |
| (1,78)  | 1:47:A:LYS:N  | 1:47:A:LYS:CA  | 1:47:A:LYS:C   | 1:48:A:ILE:N  | 4        | 1.11          |
| (1,70)  | 1:43:A:GLU:N  | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C   | 1:44:A:LEU:N  | 11       | 1.11          |
| (1,253) | 1:142:A:VAL:C | 1:143:A:LYS:N  | 1:143:A:LYS:CA | 1:143:A:LYS:C | 1        | 1.1           |
| (1,130) | 1:73:A:ASN:C  | 1:74:A:ARG:N   | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C  | 8        | 1.1           |
| (1,74)  | 1:45:A:VAL:N  | 1:45:A:VAL:CA  | 1:45:A:VAL:C   | 1:46:A:LYS:N  | 10       | 1.1           |
| (1,26)  | 1:14:A:LEU:N  | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C   | 1:15:A:GLY:N  | 20       | 1.1           |
| (1,20)  | 1:11:A:LEU:N  | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C   | 1:12:A:ALA:N  | 18       | 1.1           |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 17       | 1.1           |
| (1,2)   | 1:2:A:SER:N   | 1:2:A:SER:CA   | 1:2:A:SER:C    | 1:3:A:MET:N   | 5        | 1.1           |
| (1,150) | 1:83:A:ALA:C  | 1:84:A:VAL:N   | 1:84:A:VAL:CA  | 1:84:A:VAL:C  | 13       | 1.09          |
| (1,138) | 1:77:A:ALA:C  | 1:78:A:LYS:N   | 1:78:A:LYS:CA  | 1:78:A:LYS:C  | 15       | 1.09          |
| (1,75)  | 1:45:A:VAL:C  | 1:46:A:LYS:N   | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C  | 4        | 1.09          |
| (1,69)  | 1:42:A:LYS:C  | 1:43:A:GLU:N   | 1:43:A:GLU:CA  | 1:43:A:GLU:C  | 19       | 1.09          |
| (1,22)  | 1:12:A:ALA:N  | 1:12:A:ALA:CA  | 1:12:A:ALA:C   | 1:13:A:TYR:N  | 2        | 1.09          |
| (1,9)   | 1:5:A:LYS:C   | 1:6:A:LYS:N    | 1:6:A:LYS:CA   | 1:6:A:LYS:C   | 12       | 1.09          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 2        | 1.08          |
| (1,242) | 1:137:A:LYS:N | 1:137:A:LYS:CA | 1:137:A:LYS:C  | 1:138:A:ALA:N | 8        | 1.08          |
| (1,233) | 1:132:A:LYS:C | 1:133:A:GLU:N  | 1:133:A:GLU:CA | 1:133:A:GLU:C | 3        | 1.08          |
| (1,218) | 1:118:A:GLU:N | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C  | 1:119:A:ILE:N | 11       | 1.08          |
| (1,196) | 1:107:A:ALA:N | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C  | 1:108:A:LYS:N | 15       | 1.08          |
| (1,183) | 1:100:A:PRO:C | 1:101:A:GLU:N  | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C | 9        | 1.08          |
| (1,171) | 1:94:A:ASN:N  | 1:94:A:ASN:CA  | 1:94:A:ASN:C   | 1:95:A:ILE:N  | 10       | 1.08          |
| (1,143) | 1:80:A:LEU:N  | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C   | 1:81:A:MET:N  | 13       | 1.08          |
| (1,125) | 1:71:A:GLU:N  | 1:71:A:GLU:CA  | 1:71:A:GLU:C   | 1:72:A:GLU:N  | 20       | 1.08          |
| (1,103) | 1:60:A:ALA:N  | 1:60:A:ALA:CA  | 1:60:A:ALA:C   | 1:61:A:VAL:N  | 9        | 1.08          |
| (1,78)  | 1:47:A:LYS:N  | 1:47:A:LYS:CA  | 1:47:A:LYS:C   | 1:48:A:ILE:N  | 5        | 1.08          |
| (1,25)  | 1:13:A:TYR:C  | 1:14:A:LEU:N   | 1:14:A:LEU:CA  | 1:14:A:LEU:C  | 12       | 1.08          |
| (1,183) | 1:100:A:PRO:C | 1:101:A:GLU:N  | 1:101:A:GLU:CA | 1:101:A:GLU:C | 18       | 1.07          |
| (1,175) | 1:96:A:LEU:N  | 1:96:A:LEU:CA  | 1:96:A:LEU:C   | 1:97:A:LYS:N  | 13       | 1.07          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,163) | 1:90:A:CYS:N  | 1:90:A:CYS:CA  | 1:90:A:CYS:C   | 1:91:A:GLU:N  | 2        | 1.07          |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 10       | 1.07          |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 11       | 1.07          |
| (1,158) | 1:87:A:LEU:C  | 1:88:A:LEU:N   | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C  | 15       | 1.07          |
| (1,149) | 1:83:A:ALA:N  | 1:83:A:ALA:CA  | 1:83:A:ALA:C   | 1:84:A:VAL:N  | 15       | 1.07          |
| (1,144) | 1:80:A:LEU:C  | 1:81:A:MET:N   | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C  | 6        | 1.07          |
| (1,143) | 1:80:A:LEU:N  | 1:80:A:LEU:CA  | 1:80:A:LEU:C   | 1:81:A:MET:N  | 14       | 1.07          |
| (1,141) | 1:79:A:GLU:N  | 1:79:A:GLU:CA  | 1:79:A:GLU:C   | 1:80:A:LEU:N  | 12       | 1.07          |
| (1,107) | 1:62:A:ALA:N  | 1:62:A:ALA:CA  | 1:62:A:ALA:C   | 1:63:A:GLN:N  | 13       | 1.07          |
| (1,95)  | 1:56:A:GLU:N  | 1:56:A:GLU:CA  | 1:56:A:GLU:C   | 1:57:A:ILE:N  | 15       | 1.07          |
| (1,85)  | 1:50:A:GLU:C  | 1:51:A:SER:N   | 1:51:A:SER:CA  | 1:51:A:SER:C  | 20       | 1.07          |
| (1,46)  | 1:24:A:ILE:N  | 1:24:A:ILE:CA  | 1:24:A:ILE:C   | 1:25:A:ASP:N  | 12       | 1.07          |
| (1,34)  | 1:18:A:LEU:N  | 1:18:A:LEU:CA  | 1:18:A:LEU:C   | 1:19:A:GLU:N  | 19       | 1.07          |
| (1,27)  | 1:14:A:LEU:C  | 1:15:A:GLY:N   | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C  | 2        | 1.07          |
| (1,15)  | 1:8:A:GLU:C   | 1:9:A:ALA:N    | 1:9:A:ALA:CA   | 1:9:A:ALA:C   | 9        | 1.07          |
| (1,265) | 1:148:A:LYS:C | 1:149:A:TYR:N  | 1:149:A:TYR:CA | 1:149:A:TYR:C | 12       | 1.06          |
| (1,255) | 1:143:A:LYS:C | 1:144:A:GLU:N  | 1:144:A:GLU:CA | 1:144:A:GLU:C | 15       | 1.06          |
| (1,250) | 1:141:A:LYS:N | 1:141:A:LYS:CA | 1:141:A:LYS:C  | 1:142:A:VAL:N | 1        | 1.06          |
| (1,244) | 1:138:A:ALA:N | 1:138:A:ALA:CA | 1:138:A:ALA:C  | 1:139:A:ARG:N | 1        | 1.06          |
| (1,177) | 1:97:A:LYS:N  | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C   | 1:98:A:LYS:N  | 13       | 1.06          |
| (1,166) | 1:91:A:GLU:C  | 1:92:A:ILE:N   | 1:92:A:ILE:CA  | 1:92:A:ILE:C  | 2        | 1.06          |
| (1,153) | 1:85:A:ARG:N  | 1:85:A:ARG:CA  | 1:85:A:ARG:C   | 1:86:A:GLU:N  | 7        | 1.06          |
| (1,136) | 1:76:A:ALA:C  | 1:77:A:ALA:N   | 1:77:A:ALA:CA  | 1:77:A:ALA:C  | 20       | 1.06          |
| (1,131) | 1:74:A:ARG:N  | 1:74:A:ARG:CA  | 1:74:A:ARG:C   | 1:75:A:GLU:N  | 18       | 1.06          |
| (1,119) | 1:68:A:GLY:N  | 1:68:A:GLY:CA  | 1:68:A:GLY:C   | 1:69:A:VAL:N  | 6        | 1.06          |
| (1,100) | 1:58:A:ALA:C  | 1:59:A:GLU:N   | 1:59:A:GLU:CA  | 1:59:A:GLU:C  | 15       | 1.06          |
| (1,77)  | 1:46:A:LYS:C  | 1:47:A:LYS:N   | 1:47:A:LYS:CA  | 1:47:A:LYS:C  | 16       | 1.06          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 4        | 1.06          |
| (1,20)  | 1:11:A:LEU:N  | 1:11:A:LEU:CA  | 1:11:A:LEU:C   | 1:12:A:ALA:N  | 10       | 1.06          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 10       | 1.05          |
| (1,187) | 1:102:A:LEU:C | 1:103:A:ASP:N  | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C | 16       | 1.05          |
| (1,79)  | 1:47:A:LYS:C  | 1:48:A:ILE:N   | 1:48:A:ILE:CA  | 1:48:A:ILE:C  | 10       | 1.05          |
| (1,235) | 1:133:A:GLU:C | 1:134:A:CYS:N  | 1:134:A:CYS:CA | 1:134:A:CYS:C | 15       | 1.04          |
| (1,220) | 1:119:A:ILE:N | 1:119:A:ILE:CA | 1:119:A:ILE:C  | 1:120:A:LEU:N | 3        | 1.04          |
| (1,215) | 1:116:A:TYR:C | 1:117:A:GLU:N  | 1:117:A:GLU:CA | 1:117:A:GLU:C | 17       | 1.04          |
| (1,144) | 1:80:A:LEU:C  | 1:81:A:MET:N   | 1:81:A:MET:CA  | 1:81:A:MET:C  | 12       | 1.04          |
| (1,75)  | 1:45:A:VAL:C  | 1:46:A:LYS:N   | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C  | 11       | 1.04          |
| (1,24)  | 1:13:A:TYR:N  | 1:13:A:TYR:CA  | 1:13:A:TYR:C   | 1:14:A:LEU:N  | 17       | 1.04          |
| (1,6)   | 1:4:A:GLU:N   | 1:4:A:GLU:CA   | 1:4:A:GLU:C    | 1:5:A:LYS:N   | 20       | 1.04          |
| (1,251) | 1:141:A:LYS:C | 1:142:A:VAL:N  | 1:142:A:VAL:CA | 1:142:A:VAL:C | 17       | 1.03          |
| (1,247) | 1:139:A:ARG:C | 1:140:A:GLU:N  | 1:140:A:GLU:CA | 1:140:A:GLU:C | 8        | 1.03          |
| (1,224) | 1:121:A:LYS:N | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C  | 1:122:A:ASN:N | 1        | 1.03          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 8        | 1.03          |
| (1,222) | 1:120:A:LEU:N | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C  | 1:121:A:LYS:N | 13       | 1.03          |
| (1,221) | 1:119:A:ILE:C | 1:120:A:LEU:N  | 1:120:A:LEU:CA | 1:120:A:LEU:C | 9        | 1.03          |
| (1,198) | 1:108:A:LYS:N | 1:108:A:LYS:CA | 1:108:A:LYS:C  | 1:109:A:GLU:N | 6        | 1.03          |
| (1,188) | 1:103:A:ASP:N | 1:103:A:ASP:CA | 1:103:A:ASP:C  | 1:104:A:VAL:N | 15       | 1.03          |
| (1,52)  | 1:27:A:ALA:N  | 1:27:A:ALA:CA  | 1:27:A:ALA:C   | 1:28:A:LEU:N  | 10       | 1.03          |
| (1,50)  | 1:26:A:ALA:N  | 1:26:A:ALA:CA  | 1:26:A:ALA:C   | 1:27:A:ALA:N  | 12       | 1.03          |
| (1,37)  | 1:19:A:GLU:C  | 1:20:A:SER:N   | 1:20:A:SER:CA  | 1:20:A:SER:C  | 14       | 1.03          |
| (1,258) | 1:145:A:ALA:N | 1:145:A:ALA:CA | 1:145:A:ALA:C  | 1:146:A:ALA:N | 6        | 1.02          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Atom-3         | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,227) | 1:129:A:GLU:C | 1:130:A:VAL:N  | 1:130:A:VAL:CA | 1:130:A:VAL:C | 2        | 1.02          |
| (1,223) | 1:120:A:LEU:C | 1:121:A:LYS:N  | 1:121:A:LYS:CA | 1:121:A:LYS:C | 10       | 1.02          |
| (1,217) | 1:117:A:GLU:C | 1:118:A:GLU:N  | 1:118:A:GLU:CA | 1:118:A:GLU:C | 11       | 1.02          |
| (1,206) | 1:112:A:ALA:N | 1:112:A:ALA:CA | 1:112:A:ALA:C  | 1:113:A:LYS:N | 6        | 1.02          |
| (1,176) | 1:96:A:LEU:C  | 1:97:A:LYS:N   | 1:97:A:LYS:CA  | 1:97:A:LYS:C  | 8        | 1.02          |
| (1,75)  | 1:45:A:VAL:C  | 1:46:A:LYS:N   | 1:46:A:LYS:CA  | 1:46:A:LYS:C  | 8        | 1.02          |
| (1,28)  | 1:15:A:GLY:N  | 1:15:A:GLY:CA  | 1:15:A:GLY:C   | 1:16:A:ILE:N  | 2        | 1.02          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 11       | 1.02          |
| (1,17)  | 1:9:A:ALA:C   | 1:10:A:ASN:N   | 1:10:A:ASN:CA  | 1:10:A:ASN:C  | 14       | 1.02          |
| (1,268) | 1:150:A:LEU:N | 1:150:A:LEU:CA | 1:150:A:LEU:C  | 1:151:A:ALA:N | 17       | 1.01          |
| (1,239) | 1:135:A:LEU:C | 1:136:A:GLU:N  | 1:136:A:GLU:CA | 1:136:A:GLU:C | 5        | 1.01          |
| (1,193) | 1:105:A:SER:C | 1:106:A:LYS:N  | 1:106:A:LYS:CA | 1:106:A:LYS:C | 14       | 1.01          |
| (1,96)  | 1:56:A:GLU:C  | 1:57:A:ILE:N   | 1:57:A:ILE:CA  | 1:57:A:ILE:C  | 11       | 1.01          |
| (1,195) | 1:106:A:LYS:C | 1:107:A:ALA:N  | 1:107:A:ALA:CA | 1:107:A:ALA:C | 10       | 1.0           |
| (1,159) | 1:88:A:LEU:N  | 1:88:A:LEU:CA  | 1:88:A:LEU:C   | 1:89:A:GLU:N  | 10       | 1.0           |
| (1,128) | 1:72:A:GLU:C  | 1:73:A:ASN:N   | 1:73:A:ASN:CA  | 1:73:A:ASN:C  | 20       | 1.0           |
| (1,126) | 1:71:A:GLU:C  | 1:72:A:GLU:N   | 1:72:A:GLU:CA  | 1:72:A:GLU:C  | 4        | 1.0           |
| (1,110) | 1:63:A:GLN:C  | 1:64:A:LEU:N   | 1:64:A:LEU:CA  | 1:64:A:LEU:C  | 20       | 1.0           |
| (1,84)  | 1:50:A:GLU:N  | 1:50:A:GLU:CA  | 1:50:A:GLU:C   | 1:51:A:SER:N  | 15       | 1.0           |
| (1,5)   | 1:3:A:MET:C   | 1:4:A:GLU:N    | 1:4:A:GLU:CA   | 1:4:A:GLU:C   | 19       | 1.0           |