



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Dec 25, 2024 – 03:53 AM EST

PDB ID : 5KS5
BMRB ID : 30135
Title : Structure of the C-terminal Helical Repeat Domain of Elongation Factor 2 Kinase
Authors : Piserchio, A.; Will, N.; Snyder, I.; Ferguson, S.B.; Giles, D.H.; Dalby, K.N.; Ghose, R.
Deposited on : 2016-07-07

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.40

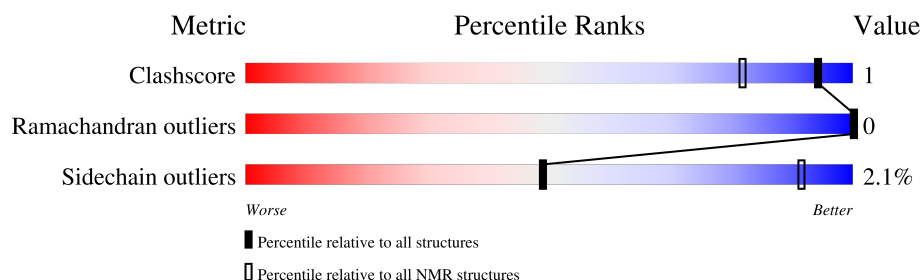
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 86%.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	210492	14027
Ramachandran outliers	207382	12486
Sidechain outliers	206894	12463

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	103	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 19 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:665-A:676, A:685-A:720 (48)	0.27	19

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 4 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1568 atoms, of which 743 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Eukaryotic elongation factor 2 kinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	103	Total	C	H	N	O	S	0
			1568	506	743	137	171	11	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

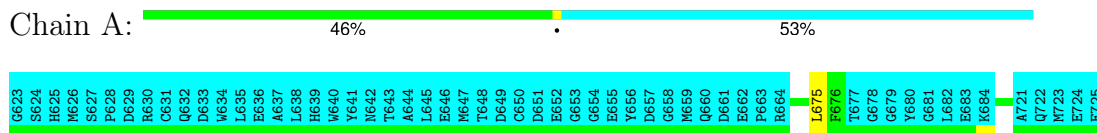
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	623	GLY	-	expression tag	UNP O00418
A	624	SER	-	expression tag	UNP O00418
A	625	HIS	-	expression tag	UNP O00418
A	626	MET	-	expression tag	UNP O00418

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase

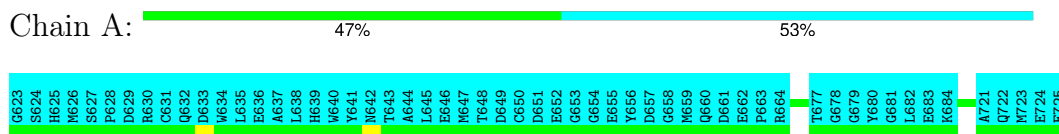


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

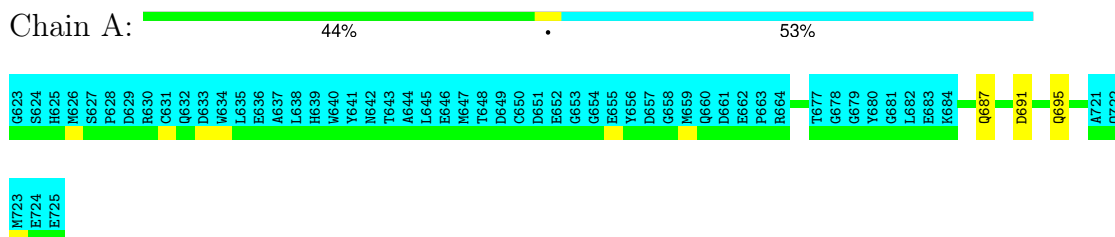
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



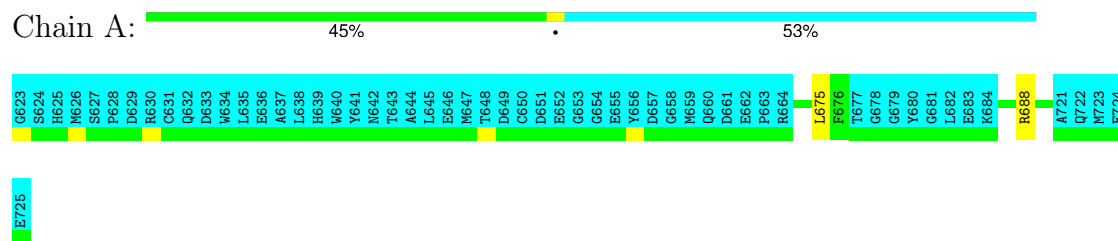
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



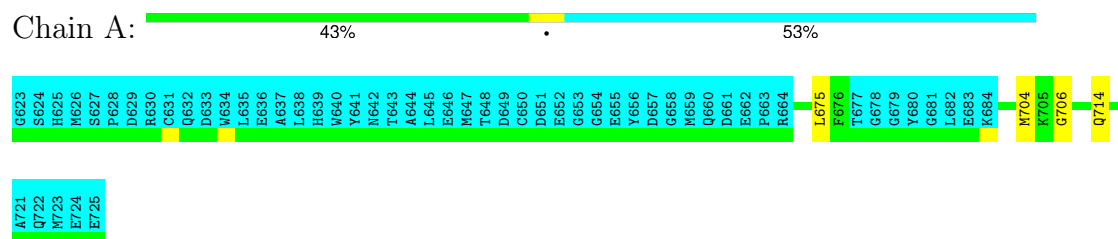
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



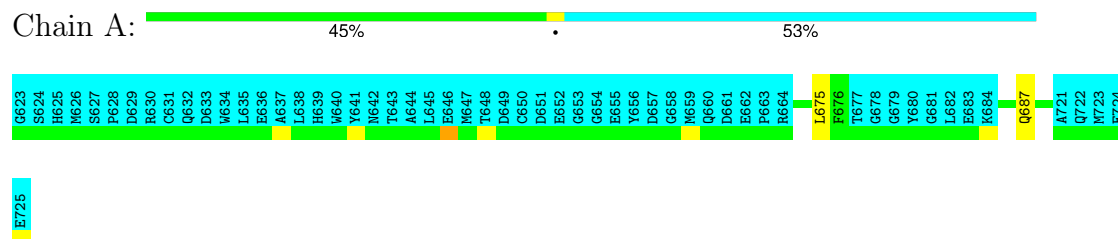
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



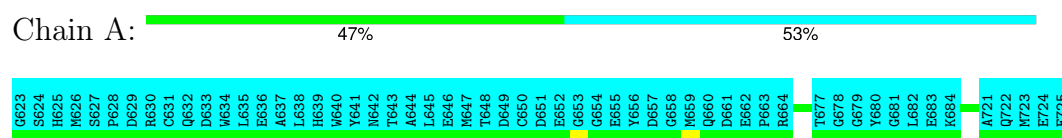
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



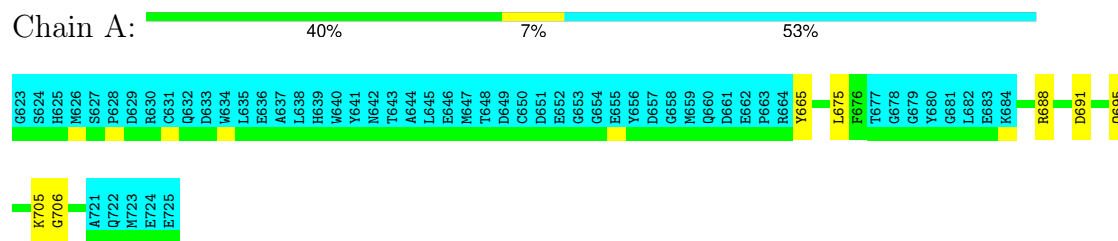
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



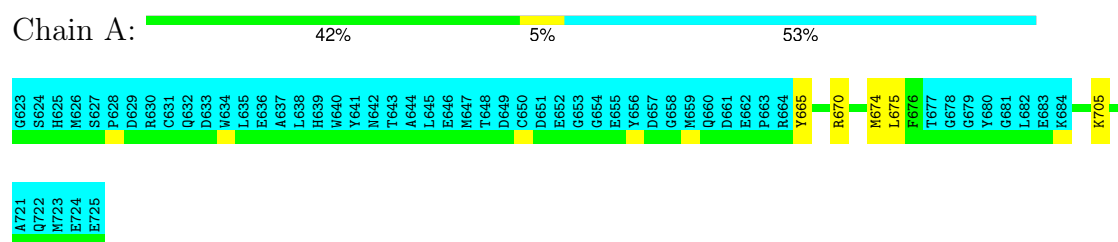
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



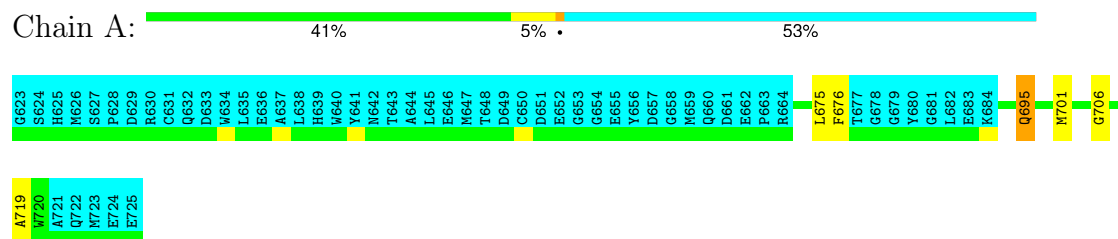
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



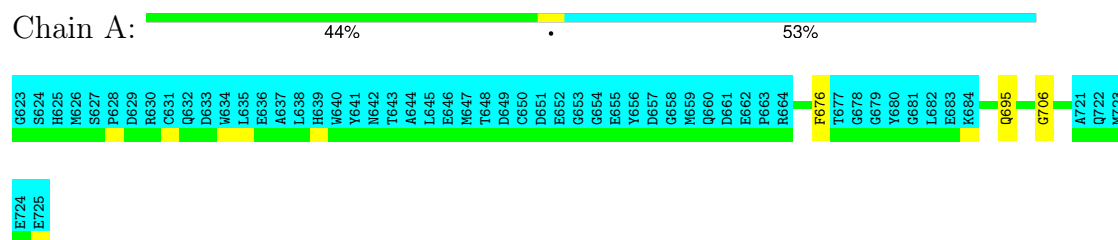
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



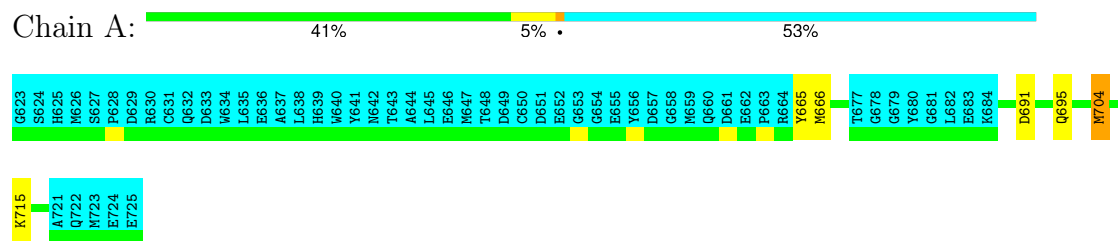
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



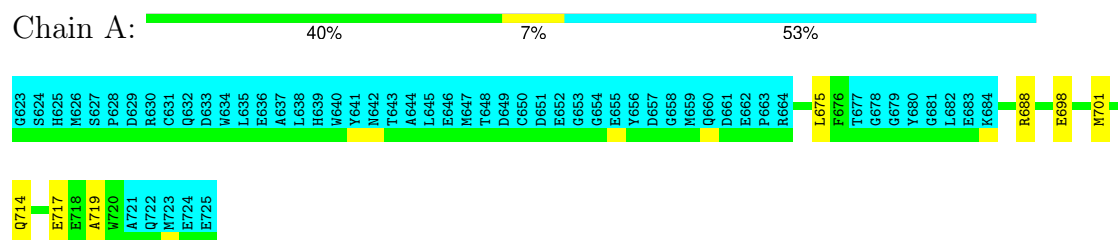
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



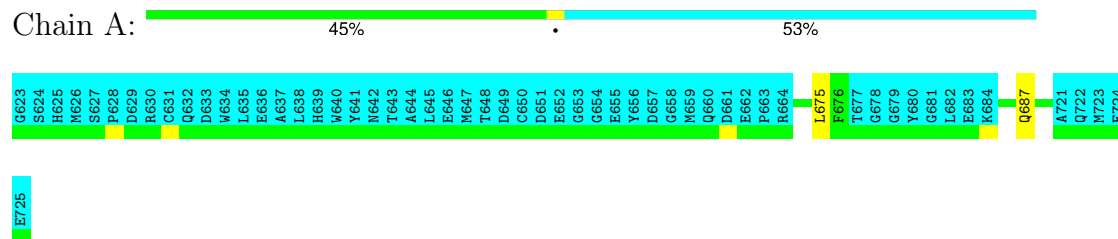
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



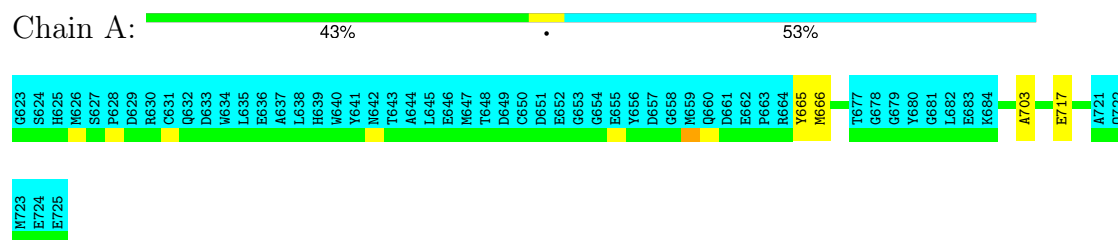
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



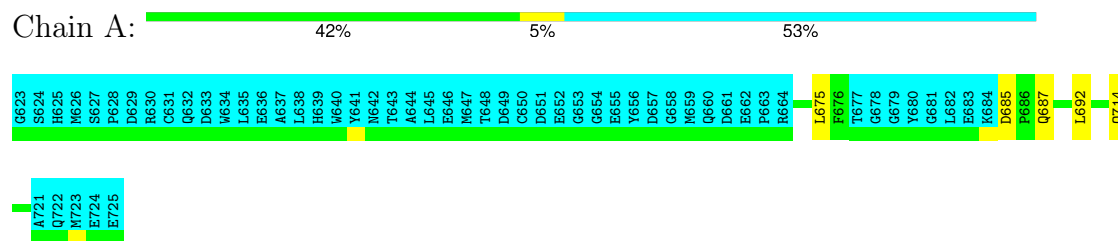
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



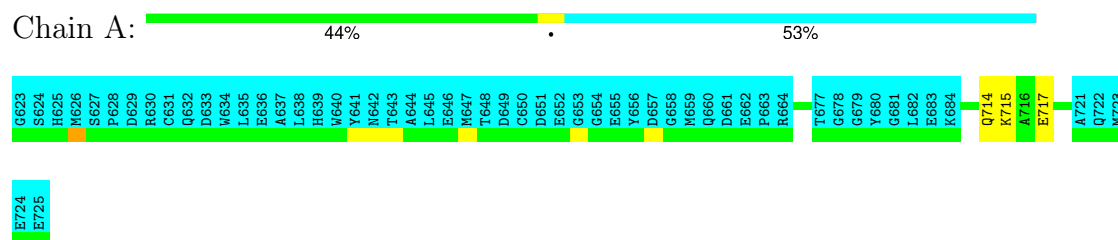
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



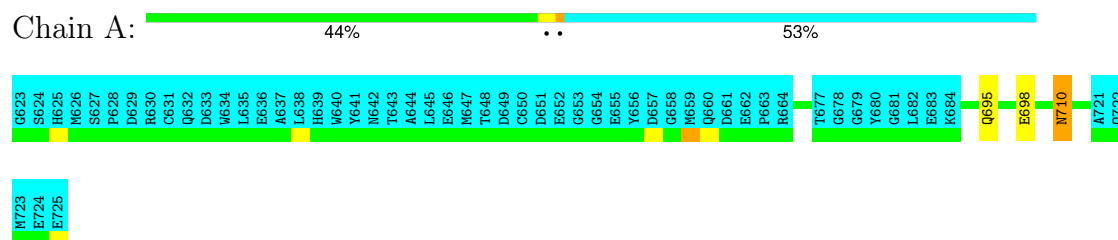
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



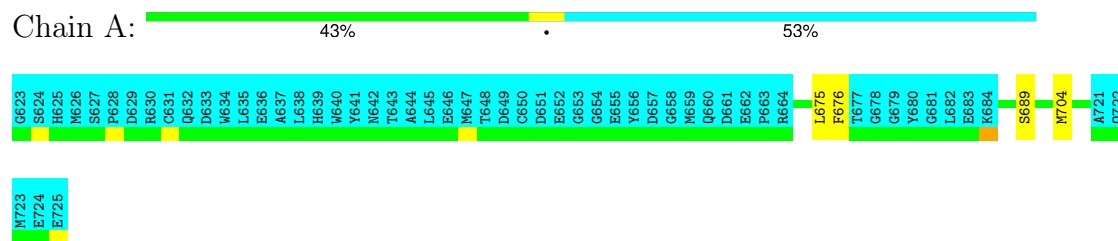
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



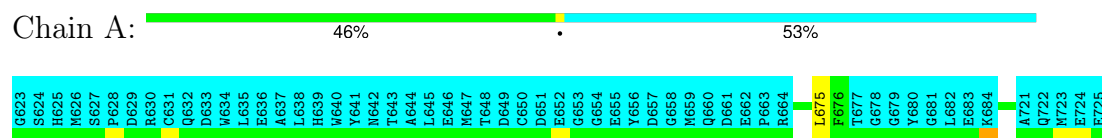
4.2.19 Score per residue for model 19 (medoid)

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 400 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
ARIA	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1138
Number of shifts mapped to atoms	1138
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	86%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	388	366	366	1±1
All	All	7760	7320	7320	16

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 1.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:665:TYR:CE2	1:A:666:MET:HG3	0.53	2.39	11	2
1:A:665:TYR:OH	1:A:705:LYS:HE2	0.52	2.05	8	1
1:A:665:TYR:OH	1:A:705:LYS:HE3	0.50	2.06	7	1
1:A:676:PHE:CZ	1:A:719:ALA:HA	0.50	2.41	9	1
1:A:695:GLN:HE21	1:A:695:GLN:HA	0.49	1.67	9	1
1:A:691:ASP:O	1:A:695:GLN:HG2	0.48	2.08	2	2
1:A:691:ASP:O	1:A:695:GLN:HG3	0.47	2.09	7	2
1:A:675:LEU:HD11	1:A:688:ARG:NH1	0.46	2.26	3	1
1:A:676:PHE:HB2	1:A:689:SER:OG	0.43	2.13	19	1
1:A:698:GLU:O	1:A:701:MET:HG2	0.43	2.13	12	1
1:A:670:ARG:O	1:A:674:MET:HG3	0.42	2.15	8	1
1:A:710:ASN:HD22	1:A:710:ASN:C	0.40	2.19	18	1
1:A:685:ASP:OD2	1:A:687:GLN:HB3	0.40	2.17	15	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	48/103 (47%)	47±1 (98±1%)	1±1 (2±1%)	0±0 (0±0%)	100	100
All	All	960/2060 (47%)	939 (98%)	21 (2%)	0 (0%)	100	100

There are no Ramachandran outliers.

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	36/81 (44%)	35±1 (98±2%)	1±1 (2±2%)	49	91
All	All	720/1620 (44%)	705 (98%)	15 (2%)	49	91

All 9 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	687	GLN	3
1	A	695	GLN	3
1	A	688	ARG	2
1	A	715	LYS	2
1	A	714	GLN	1
1	A	704	MET	1
1	A	692	LEU	1
1	A	698	GLU	1
1	A	710	ASN	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 86% for the well-defined parts and 85% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *CS_calib_v2*

7.1.1 Bookkeeping [i](#)

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

Total number of shifts	1138
Number of shifts mapped to atoms	1138
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	101	-0.40 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	93	0.46 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	100	-0.30 ± 0.14	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	98	-0.29 ± 0.21	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 86%, i.e. 564 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 653. 0 out of 4 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	240/240 (100%)	97/97 (100%)	96/96 (100%)	47/47 (100%)
Sidechain	293/355 (83%)	196/230 (85%)	92/109 (84%)	5/16 (31%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	31/58 (53%)	16/27 (59%)	14/30 (47%)	1/1 (100%)
Overall	564/653 (86%)	309/354 (87%)	202/235 (86%)	53/64 (83%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 85%, i.e. 1137 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1337. 0 out of 8 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	502/518 (97%)	204/212 (96%)	201/206 (98%)	97/100 (97%)
Sidechain	566/694 (82%)	374/445 (84%)	184/222 (83%)	8/27 (30%)
Aromatic	69/125 (55%)	35/59 (59%)	31/59 (53%)	3/7 (43%)
Overall	1137/1337 (85%)	613/716 (86%)	416/487 (85%)	108/134 (81%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

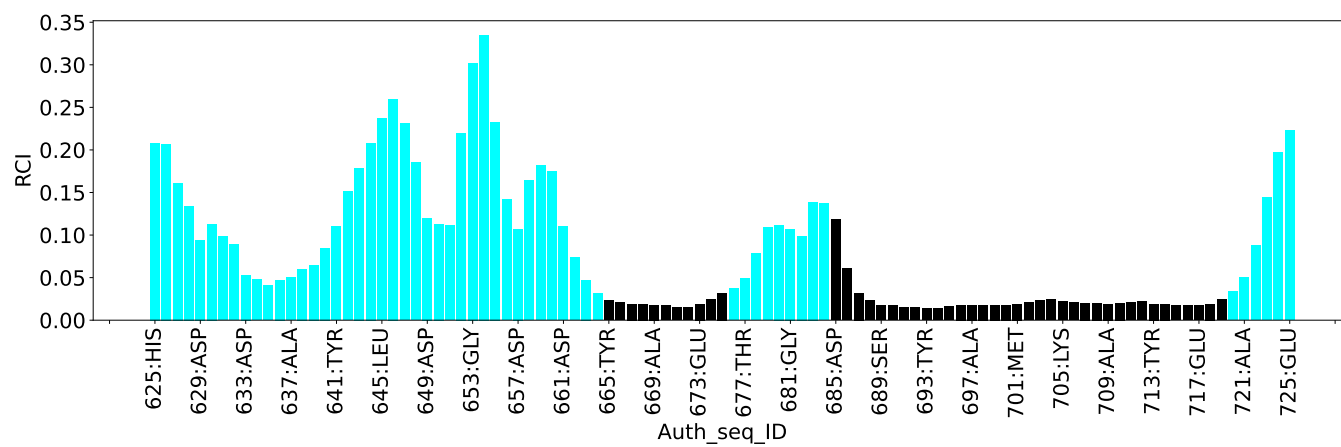
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	715	LYS	HB3	0.16	0.46 – 3.04	-6.2

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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	1663
Intra-residue ($ i-j =0$)	610
Sequential ($ i-j =1$)	401
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	361
Long range ($ i-j \geq 5$)	291
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	683
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	22.8
Number of long range restraints per residue ¹	2.8

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	19.2	0.2
0.2-0.5 (Medium)	44.5	0.5
>0.5 (Large)	78.5	6.46

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)	84.0	10.0
10.0-20.0 (Medium)	46.4	19.99
>20.0 (Large)	275.9	125.66

9 Distance violation analysis ⓘ

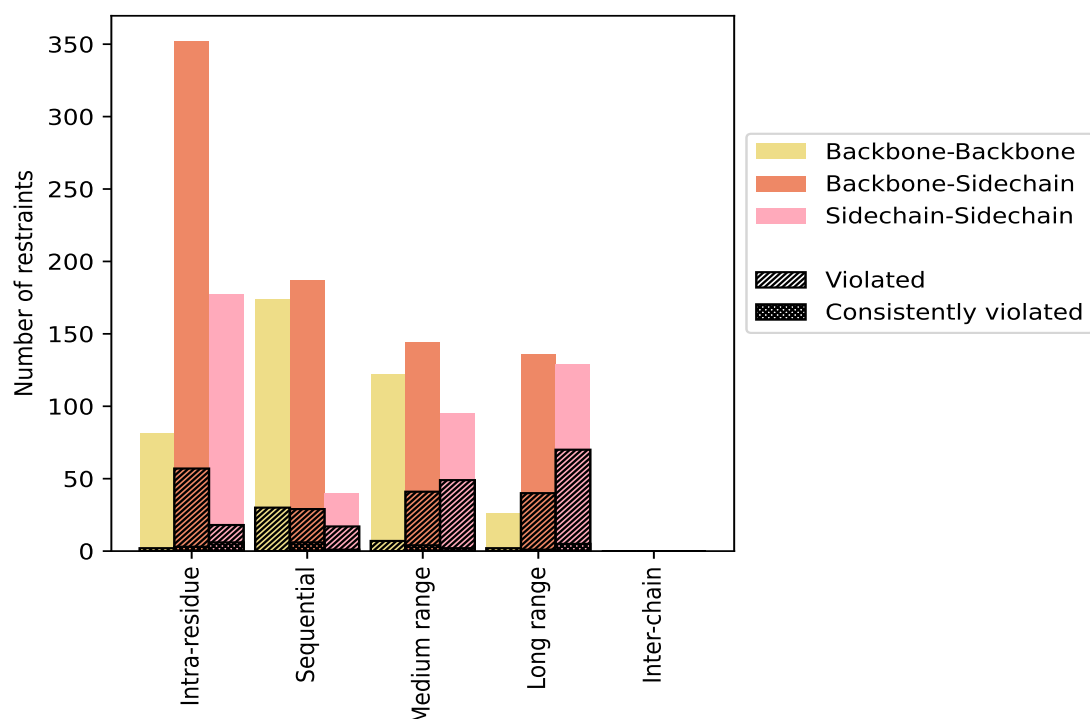
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	610	36.7	77	12.6	4.6	9	1.5	0.5
Backbone-Backbone	81	4.9	2	2.5	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	352	21.2	57	16.2	3.4	3	0.9	0.2
Sidechain-Sidechain	177	10.6	18	10.2	1.1	6	3.4	0.4
Sequential ($i-j =1$)	401	24.1	76	19.0	4.6	7	1.7	0.4
Backbone-Backbone	174	10.5	30	17.2	1.8	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	187	11.2	29	15.5	1.7	6	3.2	0.4
Sidechain-Sidechain	40	2.4	17	42.5	1.0	1	2.5	0.1
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	361	21.7	97	26.9	5.8	6	1.7	0.4
Backbone-Backbone	122	7.3	7	5.7	0.4	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	144	8.7	41	28.5	2.5	4	2.8	0.2
Sidechain-Sidechain	95	5.7	49	51.6	2.9	2	2.1	0.1
Long range ($i-j \geq 5$)	291	17.5	112	38.5	6.7	6	2.1	0.4
Backbone-Backbone	26	1.6	2	7.7	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	136	8.2	40	29.4	2.4	1	0.7	0.1
Sidechain-Sidechain	129	7.8	70	54.3	4.2	5	3.9	0.3
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1663	100.0	362	21.8	21.8	28	1.7	1.7
Backbone-Backbone	403	24.2	41	10.2	2.5	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	819	49.2	167	20.4	10.0	14	1.7	0.8
Sidechain-Sidechain	441	26.5	154	34.9	9.3	14	3.2	0.8

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

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



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

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	35	26	47	34	0	142	0.83	3.57	0.67	0.58
2	30	31	40	36	0	137	0.76	4.04	0.7	0.54
3	32	29	34	45	0	140	0.73	2.67	0.6	0.55
4	27	32	43	46	0	148	0.86	4.91	0.81	0.55
5	31	33	36	47	0	147	0.78	3.26	0.67	0.58
6	29	35	47	54	0	165	0.93	4.97	0.84	0.63
7	27	32	35	39	0	133	0.76	2.9	0.64	0.53
8	30	28	44	45	0	147	0.82	3.61	0.73	0.59
9	28	39	36	39	0	142	0.71	2.64	0.55	0.52
10	27	33	38	43	0	141	0.82	3.94	0.75	0.52

Continued on next page...

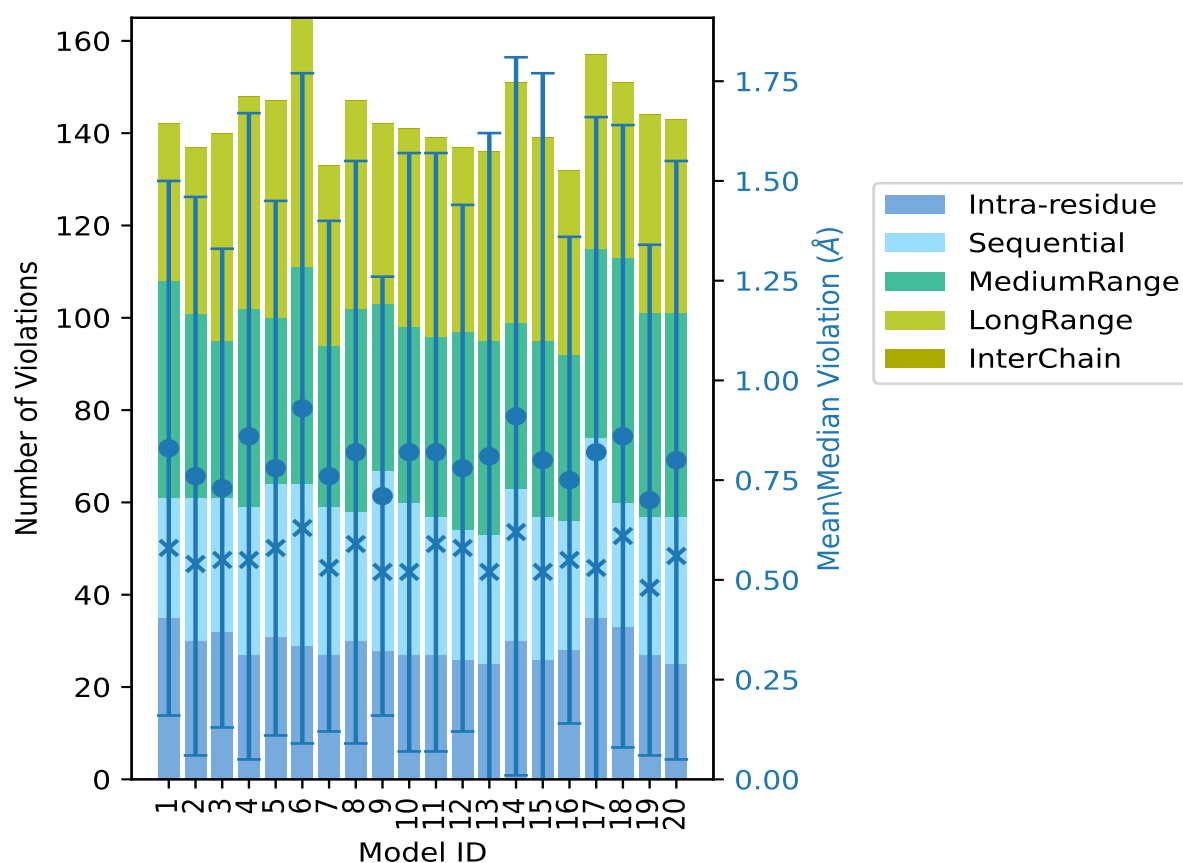
Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
11	27	30	39	43	0	139	0.82	4.74	0.75	0.59
12	26	28	43	40	0	137	0.78	3.47	0.66	0.58
13	25	28	42	41	0	136	0.81	4.67	0.81	0.52
14	30	33	36	52	0	151	0.91	6.46	0.9	0.62
15	26	31	38	44	0	139	0.8	5.95	0.97	0.52
16	28	28	36	40	0	132	0.75	2.86	0.61	0.55
17	35	39	41	42	0	157	0.82	5.64	0.84	0.53
18	33	27	53	38	0	151	0.86	3.67	0.78	0.61
19	27	30	44	43	0	144	0.7	4.05	0.64	0.48
20	25	32	44	42	0	143	0.8	4.04	0.75	0.56

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints,

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model ⓘ



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

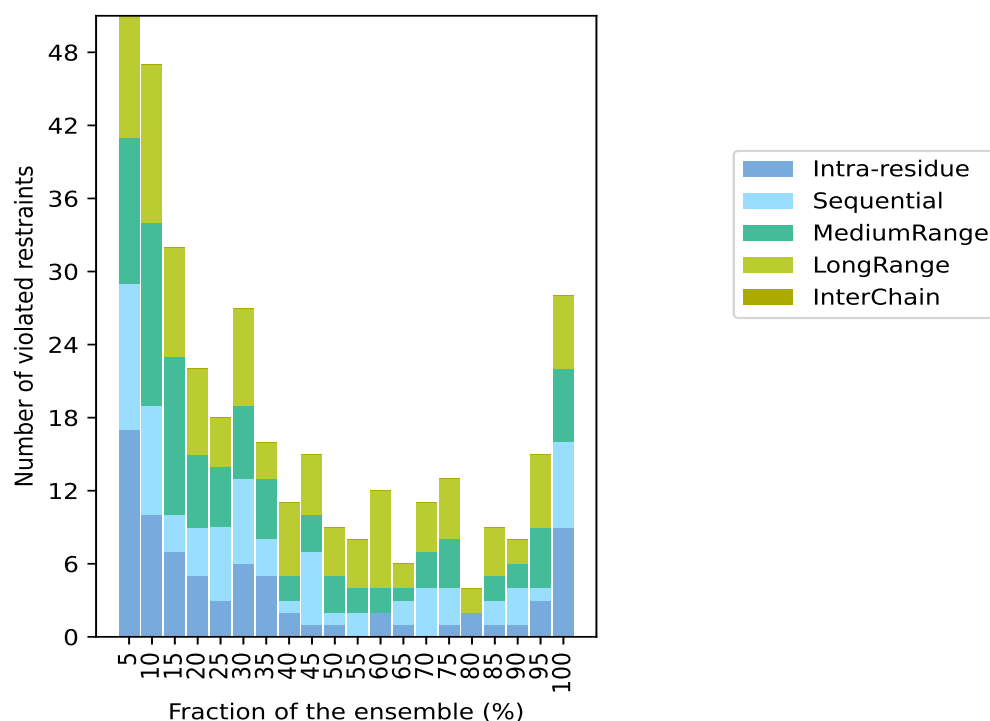
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1301(IR:533, SQ:325, MR:264, LR:179, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
17	12	12	10	0	51	1	5.0
10	9	15	13	0	47	2	10.0
7	3	13	9	0	32	3	15.0
5	4	6	7	0	22	4	20.0
3	6	5	4	0	18	5	25.0
6	7	6	8	0	27	6	30.0
5	3	5	3	0	16	7	35.0
2	1	2	6	0	11	8	40.0
1	6	3	5	0	15	9	45.0
1	1	3	4	0	9	10	50.0
0	2	2	4	0	8	11	55.0
2	0	2	8	0	12	12	60.0
1	2	1	2	0	6	13	65.0
0	4	3	4	0	11	14	70.0
1	3	4	5	0	13	15	75.0
2	0	0	2	0	4	16	80.0
1	2	2	4	0	9	17	85.0
1	3	2	2	0	8	18	90.0
3	1	5	6	0	15	19	95.0
9	7	6	6	0	28	20	100.0

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints,

⁵Inter-chain restraints, ⁶ Number of models with violations

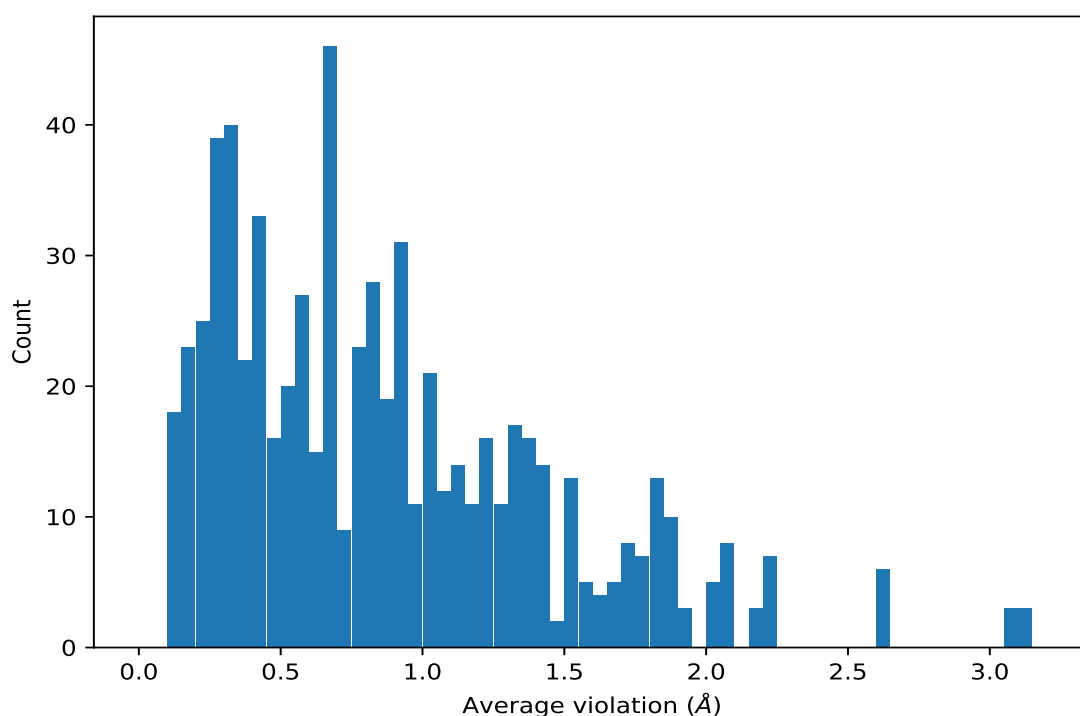
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG21	20	2.01	0.51	1.98
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	20	2.01	0.51	1.98
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG23	20	2.01	0.51	1.98
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	20	1.87	0.93	1.23
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	20	1.87	0.93	1.23
(3,89)	1:709:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	20	1.87	0.93	1.23
(3,89)	1:709:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	20	1.87	0.93	1.23
(3,89)	1:709:A:ALA:HB2	1:711:A:GLN:HG3	20	1.87	0.93	1.23
(3,89)	1:709:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HG3	20	1.87	0.93	1.23
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	20	1.62	0.11	1.6
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	20	1.5	0.67	1.58
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	20	1.5	0.67	1.58
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	20	1.42	0.7	1.17
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	20	1.42	0.7	1.17
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	20	1.42	0.7	1.17
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	20	1.36	0.09	1.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HB2	20	1.36	0.09	1.38
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	20	1.36	0.09	1.38
(3,91)	1:669:A:ALA:HB2	1:667:A:MET:HB2	20	1.36	0.09	1.38
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	20	1.24	0.74	1.27
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE1	20	1.24	0.74	1.27
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE3	20	1.24	0.74	1.27
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	20	1.14	0.34	1.11
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	20	1.08	0.16	1.13
(3,104)	1:673:A:GLU:HA	1:692:A:LEU:HD23	20	1.08	0.16	1.13
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD23	20	1.03	0.8	0.84
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	20	1.03	0.8	0.84
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	20	1.03	0.8	0.84
(1,290)	1:692:A:LEU:HD23	1:692:A:LEU:HB2	20	0.97	0.47	1.24
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	20	0.97	0.47	1.24
(1,290)	1:692:A:LEU:HD22	1:692:A:LEU:HB2	20	0.97	0.47	1.24
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	20	0.87	0.04	0.86
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	20	0.82	0.12	0.82
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG22	20	0.82	0.12	0.82
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	20	0.82	0.12	0.82
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	20	0.8	0.2	0.82
(3,170)	1:709:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HB2	20	0.8	0.2	0.82
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HB2	20	0.8	0.2	0.82
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HB2	20	0.8	0.2	0.82
(3,170)	1:709:A:ALA:HB2	1:711:A:GLN:HB2	20	0.8	0.2	0.82
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HB2	20	0.8	0.2	0.82
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	20	0.78	0.08	0.78
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB3	20	0.78	0.08	0.78
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	20	0.78	0.08	0.78
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	20	0.65	0.09	0.68
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	20	0.6	0.11	0.62
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	20	0.6	0.11	0.62
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	20	0.6	0.11	0.62
(1,341)	1:697:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HA	20	0.57	0.03	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	20	0.57	0.03	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HA	20	0.57	0.03	0.58
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	20	0.54	0.04	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	20	0.52	0.02	0.52
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	20	0.44	0.0	0.44
(3,63)	1:701:A:MET:HG2	1:701:A:MET:HB2	20	0.44	0.0	0.44
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	20	0.43	0.02	0.43
(3,79)	1:682:A:LEU:HD11	1:682:A:LEU:HG	20	0.37	0.01	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	20	0.37	0.01	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,79)	1:682:A:LEU:HD12	1:682:A:LEU:HG	20	0.37	0.01	0.37
(3,79)	1:645:A:LEU:HD12	1:645:A:LEU:HG	20	0.37	0.01	0.37
(3,79)	1:645:A:LEU:HD13	1:645:A:LEU:HG	20	0.37	0.01	0.37
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	20	0.34	0.12	0.29
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	20	0.34	0.12	0.29
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB1	20	0.34	0.12	0.29
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD21	20	0.3	0.01	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD22	20	0.3	0.01	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD22	20	0.3	0.01	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD23	20	0.3	0.01	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD23	20	0.3	0.01	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD21	20	0.3	0.01	0.3
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	20	0.2	0.05	0.2
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	20	0.19	0.01	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	20	0.19	0.01	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD11	1:708:A:LEU:HG	20	0.19	0.01	0.19
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	20	0.17	0.02	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG21	20	0.17	0.02	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG22	1:643:A:THR:HB	20	0.17	0.02	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG22	20	0.17	0.02	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG23	1:643:A:THR:HB	20	0.17	0.02	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG21	1:643:A:THR:HB	20	0.17	0.02	0.18
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	19	2.6	0.28	2.53
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:692:A:LEU:HG	19	2.6	0.28	2.53
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:700:A:ALA:HB2	19	2.6	0.28	2.53
(3,85)	1:694:A:THR:HG21	1:668:A:LEU:HB3	19	2.6	0.28	2.53
(3,85)	1:694:A:THR:HG21	1:692:A:LEU:HG	19	2.6	0.28	2.53
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:668:A:LEU:HB3	19	2.6	0.28	2.53
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	19	1.3	0.13	1.29
(1,489)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HG3	19	0.93	0.67	0.78
(1,489)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HG3	19	0.93	0.67	0.78
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	19	0.93	0.67	0.78
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	19	0.78	0.01	0.78
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	19	0.77	0.37	0.78
(1,311)	1:703:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HB3	19	0.77	0.37	0.78
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	19	0.77	0.37	0.78
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	19	0.72	0.34	0.93
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	19	0.65	0.28	0.61
(1,246)	1:692:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HB2	19	0.53	0.36	0.49
(1,246)	1:692:A:LEU:HD12	1:671:A:GLU:HB2	19	0.53	0.36	0.49
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	19	0.53	0.36	0.49
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	19	0.49	0.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,506)	1:672:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HA	19	0.49	0.18	0.43
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	19	0.49	0.18	0.43
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	19	0.45	0.13	0.46
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	19	0.45	0.13	0.46
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	19	0.43	0.11	0.44
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	19	0.42	0.16	0.43
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	19	0.32	0.08	0.36
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	19	0.32	0.08	0.36
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	19	0.32	0.08	0.36
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG2	19	0.31	0.04	0.3
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	19	0.31	0.04	0.3
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	19	0.16	0.01	0.16
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	18	1.43	0.27	1.48
(1,419)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HB2	18	1.43	0.27	1.48
(1,419)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HB2	18	1.43	0.27	1.48
(1,333)	1:716:A:ALA:HB2	1:715:A:LYS:HD2	18	1.21	0.35	1.3
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	18	1.21	0.35	1.3
(1,333)	1:716:A:ALA:HB3	1:715:A:LYS:HD2	18	1.21	0.35	1.3
(1,497)	1:666:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	18	1.21	0.83	1.13
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	18	1.21	0.83	1.13
(1,497)	1:666:A:MET:HE3	1:663:A:PRO:HA	18	1.21	0.83	1.13
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	18	1.01	0.41	1.02
(1,514)	1:637:A:ALA:HB2	1:634:A:TRP:HZ3	18	1.01	0.41	1.02
(1,514)	1:637:A:ALA:HB3	1:634:A:TRP:HZ3	18	1.01	0.41	1.02
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	18	0.57	0.09	0.59
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	18	0.41	0.04	0.42
(3,94)	1:716:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	18	0.22	0.07	0.2
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	18	0.22	0.07	0.2
(3,94)	1:716:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	18	0.22	0.07	0.2
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	18	0.19	0.02	0.2
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD12	17	1.84	1.16	1.24
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	17	1.84	1.16	1.24
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD13	17	1.84	1.16	1.24
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	17	1.6	0.87	1.55
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB2	17	1.29	0.69	1.66
(3,87)	1:709:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HE2	17	1.29	0.69	1.66
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB1	17	1.29	0.69	1.66
(3,87)	1:709:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HE2	17	1.29	0.69	1.66
(3,87)	1:709:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HE2	17	1.29	0.69	1.66
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB3	17	1.29	0.69	1.66
(1,377)	1:700:A:ALA:HB2	1:708:A:LEU:HD12	17	0.7	0.22	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD11	17	0.7	0.22	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD11	17	0.7	0.22	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD13	17	0.7	0.22	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD12	17	0.7	0.22	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB2	1:708:A:LEU:HD13	17	0.7	0.22	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD12	17	0.7	0.22	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD13	17	0.7	0.22	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB2	1:708:A:LEU:HD11	17	0.7	0.22	0.68
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD22	17	0.62	0.02	0.63
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	17	0.62	0.02	0.63
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD21	17	0.62	0.02	0.63
(3,122)	1:699:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HD2	17	0.6	0.22	0.57
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	17	0.6	0.22	0.57
(3,122)	1:699:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HD2	17	0.6	0.22	0.57
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	17	0.54	0.18	0.55
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	17	0.51	0.21	0.46
(3,147)	1:636:A:GLU:HB2	1:706:A:GLY:HA2	17	0.51	0.21	0.46
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	17	0.29	0.06	0.28
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD12	16	0.71	0.01	0.71
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	16	0.71	0.01	0.71
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD13	16	0.71	0.01	0.71
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD22	16	0.67	0.74	0.4
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD23	16	0.67	0.74	0.4
(1,360)	1:674:A:MET:HE2	1:682:A:LEU:HD22	16	0.67	0.74	0.4
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD22	16	0.67	0.74	0.4
(1,360)	1:674:A:MET:HE2	1:682:A:LEU:HD21	16	0.67	0.74	0.4
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD21	16	0.67	0.74	0.4
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD23	16	0.67	0.74	0.4
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	16	0.32	0.09	0.32
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD21	16	0.32	0.09	0.32
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD23	16	0.32	0.09	0.32
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD23	16	0.23	0.08	0.24
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD22	16	0.23	0.08	0.24
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	16	0.23	0.08	0.24
(1,503)	1:666:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	15	1.79	0.89	1.49
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	15	1.79	0.89	1.49
(1,503)	1:666:A:MET:HE3	1:705:A:LYS:HE2	15	1.79	0.89	1.49
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	15	1.37	0.67	1.43
(1,490)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HD2	15	0.99	0.69	0.96
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	15	0.99	0.69	0.96
(1,490)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HD2	15	0.99	0.69	0.96
(1,362)	1:667:A:MET:HE1	1:668:A:LEU:HD11	15	0.8	0.75	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE3	1:668:A:LEU:HD11	15	0.8	0.75	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD13	15	0.8	0.75	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE1	1:668:A:LEU:HD12	15	0.8	0.75	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE3	1:668:A:LEU:HD13	15	0.8	0.75	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD11	15	0.8	0.75	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE1	1:668:A:LEU:HD13	15	0.8	0.75	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD12	15	0.8	0.75	0.47
(1,414)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HG3	15	0.79	0.16	0.82
(1,414)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HG3	15	0.79	0.16	0.82
(1,414)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HG3	15	0.79	0.16	0.82
(3,28)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HB2	15	0.75	0.68	0.6
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	15	0.75	0.68	0.6
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	15	0.58	0.21	0.67
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB1	15	0.58	0.21	0.67
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB3	15	0.58	0.21	0.67
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	15	0.46	0.18	0.46
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD21	15	0.44	0.14	0.44
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD23	15	0.44	0.14	0.44
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD22	15	0.44	0.14	0.44
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	15	0.35	0.17	0.29
(1,528)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HA	15	0.35	0.17	0.29
(1,528)	1:637:A:ALA:HB3	1:635:A:LEU:HA	15	0.35	0.17	0.29
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB3	15	0.34	0.18	0.28
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB2	15	0.34	0.18	0.28
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB1	15	0.34	0.18	0.28
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	15	0.34	0.18	0.28
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	15	0.31	0.09	0.33
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB3	15	0.28	0.14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB2	15	0.28	0.14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB1	15	0.28	0.14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG22	1:716:A:ALA:HB2	15	0.28	0.14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG21	1:716:A:ALA:HB2	15	0.28	0.14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG22	1:716:A:ALA:HB3	15	0.28	0.14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG21	1:716:A:ALA:HB3	15	0.28	0.14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG22	1:716:A:ALA:HB1	15	0.28	0.14	0.24
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	14	2.15	0.43	2.36
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD21	14	2.15	0.43	2.36
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD22	14	2.15	0.43	2.36
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	14	1.84	1.22	1.18
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HG3	14	1.84	1.22	1.18
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD12	14	1.73	0.98	1.73
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD11	14	1.73	0.98	1.73
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:638:A:LEU:HD21	14	1.73	0.98	1.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,13)	1:695:A:GLN:HA	1:692:A:LEU:HD11	14	1.73	0.98	1.73
(3,13)	1:695:A:GLN:HA	1:692:A:LEU:HD13	14	1.73	0.98	1.73
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD13	14	1.73	0.98	1.73
(3,13)	1:695:A:GLN:HA	1:638:A:LEU:HD21	14	1.73	0.98	1.73
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:638:A:LEU:HD23	14	1.73	0.98	1.73
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	14	1.64	1.32	1.21
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:638:A:LEU:HA	14	1.5	0.75	1.62
(3,124)	1:635:A:LEU:HD22	1:638:A:LEU:HA	14	1.5	0.75	1.62
(3,124)	1:635:A:LEU:HD23	1:638:A:LEU:HA	14	1.5	0.75	1.62
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:637:A:ALA:HA	14	1.5	0.75	1.62
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE3	14	1.23	0.99	1.44
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE1	14	1.23	0.99	1.44
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE2	14	1.23	0.99	1.44
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	14	1.22	0.41	1.12
(3,80)	1:708:A:LEU:HD12	1:665:A:TYR:HB3	14	1.12	0.41	1.18
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:665:A:TYR:HB3	14	1.12	0.41	1.18
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:705:A:LYS:HE2	14	1.12	0.41	1.18
(3,80)	1:708:A:LEU:HD13	1:665:A:TYR:HB3	14	1.12	0.41	1.18
(3,80)	1:708:A:LEU:HD12	1:705:A:LYS:HE2	14	1.12	0.41	1.18
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	14	0.51	0.13	0.55
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	14	0.49	0.06	0.5
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	14	0.42	0.15	0.42
(1,392)	1:692:A:LEU:HD22	1:691:A:ASP:HB2	14	0.42	0.15	0.42
(1,392)	1:692:A:LEU:HD21	1:691:A:ASP:HB2	14	0.42	0.15	0.42
(3,93)	1:637:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD13	13	2.07	0.99	2.56
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD12	13	2.07	0.99	2.56
(3,93)	1:637:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD12	13	2.07	0.99	2.56
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD11	13	2.07	0.99	2.56
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD13	13	2.07	0.99	2.56
(3,93)	1:637:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD13	13	2.07	0.99	2.56
(3,93)	1:637:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD22	13	2.07	0.99	2.56
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD21	13	2.07	0.99	2.56
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	13	0.49	0.14	0.51
(3,125)	1:684:A:LYS:HG3	1:689:A:SER:HB2	13	0.4	0.18	0.4
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:714:A:GLN:HA	13	0.4	0.18	0.4
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:689:A:SER:HB2	13	0.4	0.18	0.4
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	13	0.22	0.09	0.2
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB3	13	0.22	0.07	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB1	1:672:A:ALA:HB2	13	0.22	0.07	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB2	1:672:A:ALA:HB2	13	0.22	0.07	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB1	13	0.22	0.07	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB2	13	0.22	0.07	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,98)	1:669:A:ALA:HB2	1:672:A:ALA:HB1	13	0.22	0.07	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB1	1:672:A:ALA:HB1	13	0.22	0.07	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB2	1:672:A:ALA:HB3	13	0.22	0.07	0.21
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	13	0.17	0.04	0.17
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	12	1.9	0.84	1.86
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HE2	12	1.9	0.84	1.86
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE3	12	1.66	0.9	1.6
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE1	12	1.66	0.9	1.6
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE2	12	1.66	0.9	1.6
(1,524)	1:635:A:LEU:HD12	1:706:A:GLY:HA3	12	1.43	1.13	1.04
(1,524)	1:635:A:LEU:HD11	1:706:A:GLY:HA3	12	1.43	1.13	1.04
(1,524)	1:635:A:LEU:HD13	1:706:A:GLY:HA3	12	1.43	1.13	1.04
(3,92)	1:637:A:ALA:HB1	1:648:A:THR:HG21	12	1.31	0.77	1.27
(3,92)	1:637:A:ALA:HB2	1:648:A:THR:HG23	12	1.31	0.77	1.27
(3,92)	1:637:A:ALA:HB3	1:643:A:THR:HG22	12	1.31	0.77	1.27
(3,92)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HG	12	1.31	0.77	1.27
(3,92)	1:637:A:ALA:HB2	1:648:A:THR:HG22	12	1.31	0.77	1.27
(3,92)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HG	12	1.31	0.77	1.27
(3,92)	1:637:A:ALA:HB3	1:635:A:LEU:HG	12	1.31	0.77	1.27
(3,92)	1:637:A:ALA:HB3	1:648:A:THR:HG23	12	1.31	0.77	1.27
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	12	0.97	0.75	0.78
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	12	0.7	0.02	0.7
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD22	12	0.64	0.45	0.54
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD12	12	0.64	0.45	0.54
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD13	12	0.64	0.45	0.54
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD21	12	0.64	0.45	0.54
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD23	12	0.64	0.45	0.54
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	12	0.47	0.2	0.48
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	12	0.39	0.17	0.4
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	12	0.3	0.24	0.15
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:668:A:LEU:HB3	12	0.3	0.24	0.15
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	12	0.29	0.07	0.26
(3,175)	1:700:A:ALA:HB1	1:699:A:ALA:HA	12	0.11	0.01	0.11
(3,175)	1:700:A:ALA:HB3	1:699:A:ALA:HA	12	0.11	0.01	0.11
(3,175)	1:700:A:ALA:HB2	1:699:A:ALA:HA	12	0.11	0.01	0.11
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	11	1.45	0.82	1.25
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	11	0.68	0.56	0.3
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	11	0.58	0.44	0.52
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	11	0.44	0.2	0.4
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD11	11	0.44	0.27	0.34
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD13	11	0.44	0.27	0.34
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD12	11	0.44	0.27	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD22	11	0.44	0.27	0.34
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	11	0.35	0.18	0.34
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD21	11	0.35	0.18	0.34
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD22	11	0.35	0.18	0.34
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	11	0.35	0.24	0.26
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	11	0.28	0.08	0.27
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB2	10	1.56	0.97	1.58
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB1	10	1.56	0.97	1.58
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB3	10	1.56	0.97	1.58
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	10	1.52	1.1	1.42
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE1	10	1.07	0.94	0.84
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE3	10	1.07	0.94	0.84
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE2	10	1.07	0.94	0.84
(1,251)	1:668:A:LEU:HD23	1:664:A:ARG:HD2	10	0.95	0.7	0.78
(1,251)	1:668:A:LEU:HD22	1:664:A:ARG:HD2	10	0.95	0.7	0.78
(1,251)	1:668:A:LEU:HD21	1:664:A:ARG:HD2	10	0.95	0.7	0.78
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	10	0.92	0.36	0.96
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE2	10	0.7	0.23	0.67
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE3	10	0.7	0.23	0.67
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:704:A:MET:HE3	10	0.7	0.23	0.67
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:704:A:MET:HE2	10	0.7	0.23	0.67
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:704:A:MET:HE1	10	0.7	0.23	0.67
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE1	10	0.7	0.23	0.67
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	10	0.67	0.46	0.7
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	10	0.42	0.21	0.36
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	10	0.26	0.13	0.25
(3,283)	1:668:A:LEU:H	1:668:A:LEU:HG	10	0.26	0.13	0.25
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:646:A:GLU:HB2	9	2.2	1.43	2.19
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:714:A:GLN:HB3	9	2.2	1.43	2.19
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:701:A:MET:HE1	9	2.2	1.43	2.19
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:701:A:MET:HE2	9	2.2	1.43	2.19
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	9	1.56	0.81	1.36
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB3	9	1.4	1.7	1.17
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB2	9	1.4	1.7	1.17
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB1	9	1.4	1.7	1.17
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:639:A:HIS:HA	9	1.13	0.17	1.24
(3,123)	1:635:A:LEU:HD22	1:639:A:HIS:HA	9	1.13	0.17	1.24
(3,123)	1:635:A:LEU:HD22	1:634:A:TRP:HA	9	1.13	0.17	1.24
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HA	9	1.13	0.17	1.24
(3,121)	1:709:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD23	9	1.04	0.75	1.18
(3,121)	1:709:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD12	9	1.04	0.75	1.18
(3,121)	1:709:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD22	9	1.04	0.75	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,121)	1:709:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD22	9	1.04	0.75	1.18
(3,121)	1:709:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD21	9	1.04	0.75	1.18
(3,121)	1:709:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD13	9	1.04	0.75	1.18
(3,121)	1:709:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD23	9	1.04	0.75	1.18
(3,121)	1:709:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD23	9	1.04	0.75	1.18
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	9	0.94	0.34	1.05
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	9	0.93	0.21	0.93
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	9	0.86	0.39	0.95
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB2	9	0.86	0.39	0.95
(1,277)	1:708:A:LEU:HD12	1:707:A:ARG:HG3	9	0.85	0.78	0.51
(1,277)	1:708:A:LEU:HD13	1:707:A:ARG:HG3	9	0.85	0.78	0.51
(1,277)	1:708:A:LEU:HD11	1:707:A:ARG:HG3	9	0.85	0.78	0.51
(1,422)	1:635:A:LEU:HD13	1:636:A:GLU:HB2	9	0.65	0.36	0.61
(1,422)	1:635:A:LEU:HD11	1:636:A:GLU:HB2	9	0.65	0.36	0.61
(1,422)	1:635:A:LEU:HD12	1:636:A:GLU:HB2	9	0.65	0.36	0.61
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:725:A:GLU:HA	9	0.43	0.16	0.42
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	9	0.43	0.16	0.42
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	9	0.38	0.03	0.39
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	9	0.33	0.2	0.29
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD21	9	0.28	0.1	0.29
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD22	9	0.28	0.1	0.29
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD23	9	0.28	0.1	0.29
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	9	0.23	0.1	0.21
(1,421)	1:708:A:LEU:HD13	1:711:A:GLN:HB2	8	1.43	1.23	0.86
(1,421)	1:708:A:LEU:HD11	1:711:A:GLN:HB2	8	1.43	1.23	0.86
(1,421)	1:708:A:LEU:HD12	1:711:A:GLN:HB2	8	1.43	1.23	0.86
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	8	1.4	1.09	0.8
(3,164)	1:719:A:ALA:HB2	1:685:A:ASP:HB3	8	0.86	0.32	0.98
(3,164)	1:719:A:ALA:HB3	1:685:A:ASP:HB3	8	0.86	0.32	0.98
(3,164)	1:719:A:ALA:HB2	1:717:A:GLU:HG2	8	0.86	0.32	0.98
(3,164)	1:719:A:ALA:HB1	1:717:A:GLU:HG2	8	0.86	0.32	0.98
(3,164)	1:719:A:ALA:HB1	1:685:A:ASP:HB3	8	0.86	0.32	0.98
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	8	0.82	0.6	0.66
(1,276)	1:708:A:LEU:HD11	1:666:A:MET:HG2	8	0.77	1.02	0.42
(1,276)	1:708:A:LEU:HD12	1:666:A:MET:HG2	8	0.77	1.02	0.42
(1,276)	1:708:A:LEU:HD13	1:666:A:MET:HG2	8	0.77	1.02	0.42
(1,335)	1:697:A:ALA:HB2	1:713:A:TYR:HE2	8	0.56	0.45	0.39
(1,335)	1:697:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	8	0.56	0.45	0.39
(1,335)	1:697:A:ALA:HB1	1:713:A:TYR:HE2	8	0.56	0.45	0.39
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	8	0.56	0.23	0.72
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB1	8	0.35	0.34	0.19
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB2	8	0.35	0.34	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB3	8	0.35	0.34	0.19
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	8	0.34	0.3	0.2
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	8	0.34	0.3	0.2
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	8	0.34	0.3	0.2
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	8	0.28	0.11	0.34
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	8	0.14	0.01	0.14
(1,301)	1:643:A:THR:HG22	1:646:A:GLU:HG2	7	3.09	2.11	2.39
(1,301)	1:643:A:THR:HG23	1:646:A:GLU:HG2	7	3.09	2.11	2.39
(1,301)	1:643:A:THR:HG21	1:646:A:GLU:HG2	7	3.09	2.11	2.39
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD13	7	1.94	1.0	2.03
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD12	7	1.94	1.0	2.03
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD11	7	1.94	1.0	2.03
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB1	7	1.83	1.81	0.86
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB3	7	1.83	1.81	0.86
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB2	7	1.83	1.81	0.86
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD23	7	0.93	0.64	1.0
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD22	7	0.93	0.64	1.0
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD21	7	0.93	0.64	1.0
(1,300)	1:677:A:THR:HG21	1:673:A:GLU:HG3	7	0.93	0.74	0.61
(1,300)	1:677:A:THR:HG22	1:673:A:GLU:HG3	7	0.93	0.74	0.61
(1,300)	1:677:A:THR:HG23	1:673:A:GLU:HG3	7	0.93	0.74	0.61
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE3	7	0.88	0.5	0.61
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE1	7	0.88	0.5	0.61
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE2	7	0.88	0.5	0.61
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG22	7	0.69	0.08	0.65
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG23	7	0.69	0.08	0.65
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG21	7	0.69	0.08	0.65
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	7	0.56	0.12	0.52
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	7	0.51	0.03	0.51
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	7	0.48	0.0	0.48
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG22	7	0.45	0.02	0.44
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	7	0.45	0.02	0.44
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG21	7	0.45	0.02	0.44
(1,354)	1:719:A:ALA:HB3	1:689:A:SER:HB3	7	0.43	0.12	0.45
(1,354)	1:719:A:ALA:HB1	1:689:A:SER:HB3	7	0.43	0.12	0.45
(1,354)	1:719:A:ALA:HB2	1:689:A:SER:HB3	7	0.43	0.12	0.45
(3,27)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG2	7	0.42	0.29	0.31
(3,27)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HG2	7	0.42	0.29	0.31
(3,27)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG3	7	0.42	0.29	0.31
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	7	0.37	0.08	0.37
(3,95)	1:719:A:ALA:HB1	1:720:A:TRP:HD1	7	0.19	0.08	0.19
(3,95)	1:719:A:ALA:HB2	1:720:A:TRP:HD1	7	0.19	0.08	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,95)	1:719:A:ALA:HB3	1:720:A:TRP:HD1	7	0.19	0.08	0.19
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	7	0.16	0.03	0.15
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:647:A:MET:HG3	6	2.23	1.86	1.35
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:717:A:GLU:HG2	6	2.23	1.86	1.35
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:714:A:GLN:HG2	6	2.23	1.86	1.35
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG23	6	1.84	0.97	1.6
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG21	6	1.84	0.97	1.6
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG22	6	1.84	0.97	1.6
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD12	6	1.79	1.12	1.53
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD13	6	1.79	1.12	1.53
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD11	6	1.79	1.12	1.53
(1,515)	1:637:A:ALA:HB2	1:636:A:GLU:HB2	6	1.24	0.43	1.44
(1,515)	1:637:A:ALA:HB3	1:636:A:GLU:HB2	6	1.24	0.43	1.44
(1,515)	1:637:A:ALA:HB1	1:636:A:GLU:HB2	6	1.24	0.43	1.44
(1,416)	1:635:A:LEU:HD22	1:632:A:GLN:HB2	6	1.18	0.57	1.21
(1,416)	1:635:A:LEU:HD21	1:632:A:GLN:HB2	6	1.18	0.57	1.21
(1,416)	1:635:A:LEU:HD23	1:632:A:GLN:HB2	6	1.18	0.57	1.21
(3,161)	1:632:A:GLN:HG2	1:635:A:LEU:HD12	6	1.17	0.72	1.3
(3,161)	1:632:A:GLN:HG3	1:635:A:LEU:HD13	6	1.17	0.72	1.3
(3,161)	1:632:A:GLN:HG2	1:635:A:LEU:HD11	6	1.17	0.72	1.3
(3,161)	1:632:A:GLN:HG3	1:635:A:LEU:HD11	6	1.17	0.72	1.3
(3,75)	1:628:A:PRO:HG2	1:657:A:ASP:HB2	6	1.15	1.25	0.8
(1,1)	1:659:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	6	1.12	0.89	1.04
(1,1)	1:659:A:MET:HE3	1:663:A:PRO:HA	6	1.12	0.89	1.04
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:674:A:MET:HA	6	1.03	0.58	0.84
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:678:A:GLY:HA2	6	1.03	0.58	0.84
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD23	6	0.97	0.58	0.9
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD21	6	0.97	0.58	0.9
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD22	6	0.97	0.58	0.9
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD12	6	0.97	0.58	0.9
(1,417)	1:635:A:LEU:HD22	1:636:A:GLU:HG2	6	0.91	0.19	0.99
(1,417)	1:635:A:LEU:HD23	1:636:A:GLU:HG2	6	0.91	0.19	0.99
(1,417)	1:635:A:LEU:HD21	1:636:A:GLU:HG2	6	0.91	0.19	0.99
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD12	6	0.9	0.03	0.88
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD13	6	0.9	0.03	0.88
(1,1231)	1:656:A:TYR:H	1:626:A:MET:HB3	6	0.87	0.46	1.07
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	6	0.79	0.51	0.89
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:703:A:ALA:HB3	6	0.79	0.51	0.89
(1,803)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HB3	6	0.74	0.32	0.76
(1,837)	1:646:A:GLU:H	1:645:A:LEU:H	6	0.69	0.46	0.7
(1,770)	1:655:A:GLU:H	1:654:A:GLY:HA3	6	0.68	0.05	0.7
(1,500)	1:667:A:MET:HE3	1:667:A:MET:HG2	6	0.67	0.01	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,500)	1:667:A:MET:HE1	1:667:A:MET:HG2	6	0.67	0.01	0.68
(1,286)	1:675:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HG2	6	0.64	0.2	0.59
(1,286)	1:675:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HG2	6	0.64	0.2	0.59
(3,131)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HB2	6	0.61	0.56	0.46
(3,131)	1:638:A:LEU:HD11	1:634:A:TRP:HB2	6	0.61	0.56	0.46
(3,131)	1:638:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HB2	6	0.61	0.56	0.46
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB1	6	0.59	0.02	0.58
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB3	6	0.59	0.02	0.58
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB2	6	0.59	0.02	0.58
(1,772)	1:655:A:GLU:H	1:655:A:GLU:HB2	6	0.55	0.2	0.54
(1,305)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HD2	6	0.51	0.25	0.5
(1,305)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HD2	6	0.51	0.25	0.5
(1,605)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HA	6	0.37	0.16	0.4
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB1	6	0.26	0.12	0.26
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB2	6	0.26	0.12	0.26
(1,904)	1:709:A:ALA:H	1:708:A:LEU:HB3	6	0.17	0.03	0.17
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG2	6	0.13	0.01	0.12
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG3	6	0.13	0.01	0.12
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD13	5	1.37	0.98	1.57
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD11	5	1.37	0.98	1.57
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD12	5	1.37	0.98	1.57
(1,250)	1:692:A:LEU:HD11	1:672:A:ALA:HA	5	1.35	0.58	1.31
(1,250)	1:692:A:LEU:HD13	1:672:A:ALA:HA	5	1.35	0.58	1.31
(1,523)	1:635:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HZ3	5	1.18	0.56	1.01
(1,523)	1:635:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HZ3	5	1.18	0.56	1.01
(1,508)	1:625:A:HIS:HB3	1:656:A:TYR:HD2	5	0.92	0.55	0.75
(1,527)	1:637:A:ALA:HB1	1:633:A:ASP:HB2	5	0.89	0.87	0.3
(1,527)	1:637:A:ALA:HB3	1:633:A:ASP:HB2	5	0.89	0.87	0.3
(1,527)	1:637:A:ALA:HB2	1:633:A:ASP:HB2	5	0.89	0.87	0.3
(1,1203)	1:642:A:ASN:H	1:640:A:TRP:HA	5	0.75	0.41	0.91
(1,667)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HG	5	0.55	0.18	0.47
(1,698)	1:637:A:ALA:H	1:636:A:GLU:HB2	5	0.4	0.11	0.42
(3,83)	1:638:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HB2	5	0.38	0.16	0.39
(3,83)	1:638:A:LEU:HD23	1:634:A:TRP:HB2	5	0.38	0.16	0.39
(3,83)	1:638:A:LEU:HD22	1:634:A:TRP:HB2	5	0.38	0.16	0.39
(1,284)	1:635:A:LEU:HD23	1:635:A:LEU:HB2	5	0.38	0.04	0.35
(1,284)	1:635:A:LEU:HD21	1:635:A:LEU:HB2	5	0.38	0.04	0.35
(1,284)	1:635:A:LEU:HD22	1:635:A:LEU:HB2	5	0.38	0.04	0.35
(1,892)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:H	5	0.37	0.27	0.26
(3,57)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG3	5	0.36	0.23	0.23
(3,57)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG2	5	0.36	0.23	0.23
(3,68)	1:676:A:PHE:HZ	1:718:A:GLU:HB2	5	0.33	0.22	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,729)	1:724:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HB3	5	0.33	0.17	0.28
(1,800)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HB2	5	0.17	0.07	0.14
(3,338)	1:654:A:GLY:H	1:654:A:GLY:HA2	5	0.16	0.03	0.18
(3,338)	1:654:A:GLY:H	1:653:A:GLY:HA2	5	0.16	0.03	0.18
(1,87)	1:700:A:ALA:HA	1:709:A:ALA:HB1	5	0.16	0.05	0.15
(1,87)	1:700:A:ALA:HA	1:709:A:ALA:HB3	5	0.16	0.05	0.15
(1,895)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:HA2	5	0.13	0.01	0.14
(1,319)	1:644:A:ALA:HB3	1:718:A:GLU:HB2	4	3.13	1.57	2.36
(1,319)	1:644:A:ALA:HB2	1:718:A:GLU:HB2	4	3.13	1.57	2.36
(1,319)	1:644:A:ALA:HB1	1:718:A:GLU:HB2	4	3.13	1.57	2.36
(1,502)	1:659:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	4	1.51	1.14	1.12
(1,502)	1:659:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	4	1.51	1.14	1.12
(1,275)	1:708:A:LEU:HA	1:708:A:LEU:HD13	4	1.3	0.58	1.59
(1,275)	1:708:A:LEU:HA	1:708:A:LEU:HD11	4	1.3	0.58	1.59
(1,275)	1:708:A:LEU:HA	1:708:A:LEU:HD12	4	1.3	0.58	1.59
(1,395)	1:669:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD21	4	0.95	0.16	0.94
(1,395)	1:669:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD22	4	0.95	0.16	0.94
(2,7)	1:651:A:ASP:H	1:649:A:ASP:HB3	4	0.86	0.51	0.64
(1,376)	1:672:A:ALA:HB3	1:692:A:LEU:HD21	4	0.86	0.27	0.87
(1,376)	1:672:A:ALA:HB1	1:692:A:LEU:HD21	4	0.86	0.27	0.87
(1,376)	1:672:A:ALA:HB2	1:692:A:LEU:HD22	4	0.86	0.27	0.87
(3,137)	1:722:A:GLN:HG2	1:725:A:GLU:HB2	4	0.8	0.34	0.89
(3,99)	1:663:A:PRO:HB3	1:708:A:LEU:HB3	4	0.78	0.24	0.7
(1,972)	1:717:A:GLU:H	1:715:A:LYS:HD2	4	0.63	0.22	0.71
(1,302)	1:665:A:TYR:HE2	1:703:A:ALA:HB1	4	0.62	0.24	0.7
(3,77)	1:635:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HA	4	0.51	0.17	0.52
(3,77)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HA	4	0.51	0.17	0.52
(3,77)	1:635:A:LEU:HD11	1:634:A:TRP:HA	4	0.51	0.17	0.52
(1,727)	1:724:A:GLU:H	1:723:A:MET:H	4	0.42	0.25	0.4
(3,281)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	4	0.38	0.19	0.38
(3,281)	1:660:A:GLN:H	1:661:A:ASP:H	4	0.38	0.19	0.38
(1,746)	1:656:A:TYR:H	1:655:A:GLU:HA	4	0.34	0.09	0.32
(1,1190)	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:HE22	4	0.32	0.16	0.31
(1,1160)	1:722:A:GLN:H	1:686:A:PRO:HB2	4	0.31	0.27	0.16
(3,289)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HB3	4	0.29	0.21	0.2
(3,289)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HG	4	0.29	0.21	0.2
(1,480)	1:628:A:PRO:HD2	1:627:A:SER:HA	4	0.28	0.18	0.22
(1,428)	1:635:A:LEU:HD11	1:635:A:LEU:HA	4	0.27	0.06	0.28
(1,428)	1:635:A:LEU:HD13	1:635:A:LEU:HA	4	0.27	0.06	0.28
(1,215)	1:670:A:ARG:HD2	1:670:A:ARG:HB2	4	0.25	0.01	0.25
(1,1045)	1:665:A:TYR:H	1:663:A:PRO:HB3	4	0.24	0.13	0.22
(1,616)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HA	4	0.11	0.0	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,992)	1:687:A:GLN:HE22	1:720:A:TRP:HZ2	3	1.76	0.27	1.63
(1,279)	1:645:A:LEU:HA	1:645:A:LEU:HD22	3	1.5	0.13	1.58
(1,279)	1:645:A:LEU:HA	1:645:A:LEU:HD21	3	1.5	0.13	1.58
(1,351)	1:659:A:MET:HE3	1:662:A:GLU:HA	3	1.5	1.26	0.82
(1,351)	1:659:A:MET:HE2	1:662:A:GLU:HA	3	1.5	1.26	0.82
(1,355)	1:674:A:MET:HE3	1:671:A:GLU:HA	3	1.49	0.57	1.86
(1,355)	1:674:A:MET:HE2	1:671:A:GLU:HA	3	1.49	0.57	1.86
(1,323)	1:713:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB2	3	1.37	0.14	1.46
(1,323)	1:713:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB3	3	1.37	0.14	1.46
(1,260)	1:682:A:LEU:HD11	1:674:A:MET:HE1	3	1.33	1.58	0.27
(1,260)	1:682:A:LEU:HD11	1:674:A:MET:HE3	3	1.33	1.58	0.27
(1,260)	1:682:A:LEU:HD12	1:674:A:MET:HE1	3	1.33	1.58	0.27
(1,496)	1:716:A:ALA:HB2	1:713:A:TYR:HE2	3	1.3	0.2	1.4
(1,496)	1:716:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	3	1.3	0.2	1.4
(1,292)	1:713:A:TYR:HE2	1:694:A:THR:HG21	3	1.27	0.16	1.16
(1,292)	1:713:A:TYR:HE2	1:694:A:THR:HG23	3	1.27	0.16	1.16
(1,292)	1:713:A:TYR:HE2	1:694:A:THR:HG22	3	1.27	0.16	1.16
(1,138)	1:684:A:LYS:HE3	1:686:A:PRO:HG3	3	1.08	0.67	1.25
(1,138)	1:684:A:LYS:HE2	1:686:A:PRO:HG3	3	1.08	0.67	1.25
(1,534)	1:641:A:TYR:HD2	1:643:A:THR:HG21	3	0.92	0.49	1.26
(1,534)	1:641:A:TYR:HD2	1:643:A:THR:HG22	3	0.92	0.49	1.26
(1,534)	1:641:A:TYR:HD2	1:643:A:THR:HG23	3	0.92	0.49	1.26
(1,282)	1:675:A:LEU:HD13	1:685:A:ASP:HB3	3	0.85	0.43	1.06
(1,282)	1:675:A:LEU:HD11	1:685:A:ASP:HB3	3	0.85	0.43	1.06
(1,1235)	1:723:A:MET:H	1:725:A:GLU:HB2	3	0.84	0.12	0.91
(3,169)	1:673:A:GLU:HA	1:715:A:LYS:HD3	3	0.78	0.65	0.55
(3,169)	1:715:A:LYS:HD3	1:719:A:ALA:HA	3	0.78	0.65	0.55
(1,1229)	1:654:A:GLY:H	1:651:A:ASP:HA	3	0.74	0.36	0.5
(3,78)	1:638:A:LEU:HD11	1:634:A:TRP:HB2	3	0.73	0.17	0.72
(3,78)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HB2	3	0.73	0.17	0.72
(3,44)	1:688:A:ARG:HD2	1:692:A:LEU:HD22	3	0.67	0.54	0.37
(3,44)	1:664:A:ARG:HD2	1:668:A:LEU:HD12	3	0.67	0.54	0.37
(3,44)	1:664:A:ARG:HD2	1:668:A:LEU:HD13	3	0.67	0.54	0.37
(1,353)	1:704:A:MET:HE2	1:704:A:MET:HA	3	0.59	0.19	0.63
(1,353)	1:704:A:MET:HE1	1:704:A:MET:HA	3	0.59	0.19	0.63
(1,430)	1:708:A:LEU:HG	1:705:A:LYS:HB2	3	0.52	0.38	0.3
(1,296)	1:677:A:THR:HA	1:677:A:THR:HG23	3	0.51	0.01	0.51
(1,296)	1:677:A:THR:HA	1:677:A:THR:HG21	3	0.51	0.01	0.51
(1,939)	1:723:A:MET:H	1:723:A:MET:HG2	3	0.46	0.37	0.24
(1,969)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HB3	3	0.4	0.02	0.39
(1,452)	1:645:A:LEU:HB2	1:647:A:MET:HA	3	0.38	0.07	0.39
(2,5)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:H	3	0.31	0.24	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,933)	1:629:A:ASP:H	1:628:A:PRO:HA	3	0.3	0.07	0.3
(3,41)	1:707:A:ARG:HD2	1:707:A:ARG:HB2	3	0.29	0.02	0.3
(3,41)	1:670:A:ARG:HD2	1:670:A:ARG:HB2	3	0.29	0.02	0.3
(3,127)	1:715:A:LYS:HG2	1:673:A:GLU:HB3	3	0.29	0.04	0.27
(1,211)	1:688:A:ARG:HB2	1:691:A:ASP:HB2	3	0.28	0.03	0.27
(1,1046)	1:658:A:GLY:H	1:657:A:ASP:HA	3	0.23	0.05	0.26
(1,365)	1:700:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HE2	3	0.22	0.11	0.15
(1,365)	1:700:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HE2	3	0.22	0.11	0.15
(3,256)	1:708:A:LEU:H	1:705:A:LYS:HB2	3	0.21	0.08	0.22
(1,1154)	1:711:A:GLN:H	1:711:A:GLN:HG3	3	0.12	0.01	0.11
(3,17)	1:712:A:TYR:HD2	1:712:A:TYR:HA	3	0.11	0.0	0.11
(1,249)	1:696:A:ALA:HA	1:668:A:LEU:HD23	2	2.01	0.01	2.01
(1,249)	1:696:A:ALA:HA	1:668:A:LEU:HD21	2	2.01	0.01	2.01
(1,245)	1:675:A:LEU:HD23	1:672:A:ALA:HB3	2	1.9	0.08	1.9
(1,245)	1:675:A:LEU:HD21	1:672:A:ALA:HB1	2	1.9	0.08	1.9
(1,278)	1:675:A:LEU:HA	1:675:A:LEU:HD13	2	1.81	0.02	1.81
(1,278)	1:675:A:LEU:HA	1:675:A:LEU:HD11	2	1.81	0.02	1.81
(1,248)	1:665:A:TYR:HA	1:668:A:LEU:HD22	2	1.67	0.15	1.67
(1,248)	1:665:A:TYR:HA	1:668:A:LEU:HD23	2	1.67	0.15	1.67
(1,253)	1:634:A:TRP:HZ2	1:635:A:LEU:HD12	2	1.64	1.42	1.64
(1,1230)	1:654:A:GLY:H	1:651:A:ASP:HB3	2	1.56	0.63	1.56
(1,14)	1:628:A:PRO:HA	1:631:A:CYS:HB2	2	1.44	0.84	1.44
(3,374)	1:672:A:ALA:H	1:675:A:LEU:HD21	2	1.27	0.09	1.27
(3,374)	1:672:A:ALA:H	1:675:A:LEU:HD22	2	1.27	0.09	1.27
(1,498)	1:659:A:MET:HG2	1:659:A:MET:HE1	2	1.18	0.01	1.18
(1,498)	1:659:A:MET:HG2	1:659:A:MET:HE2	2	1.18	0.01	1.18
(1,64)	1:668:A:LEU:HA	1:668:A:LEU:HD13	2	1.11	0.02	1.11
(1,241)	1:675:A:LEU:HD21	1:671:A:GLU:HA	2	1.08	0.09	1.08
(1,241)	1:675:A:LEU:HD22	1:671:A:GLU:HA	2	1.08	0.09	1.08
(1,281)	1:675:A:LEU:HD13	1:685:A:ASP:HB2	2	1.07	0.21	1.07
(1,281)	1:675:A:LEU:HD11	1:685:A:ASP:HB2	2	1.07	0.21	1.07
(2,3)	1:722:A:GLN:HG3	1:724:A:GLU:HG2	2	1.05	0.31	1.05
(1,272)	1:665:A:TYR:HE2	1:708:A:LEU:HD11	2	1.01	0.77	1.01
(1,272)	1:665:A:TYR:HE2	1:708:A:LEU:HD12	2	1.01	0.77	1.01
(1,367)	1:720:A:TRP:HA	1:723:A:MET:HE2	2	1.01	0.6	1.01
(1,367)	1:720:A:TRP:HA	1:723:A:MET:HE3	2	1.01	0.6	1.01
(3,46)	1:684:A:LYS:HE2	1:686:A:PRO:HG2	2	1.0	0.26	1.0
(1,488)	1:665:A:TYR:HB3	1:668:A:LEU:HD21	2	0.95	0.14	0.95
(1,488)	1:665:A:TYR:HB3	1:668:A:LEU:HD22	2	0.95	0.14	0.95
(1,576)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HE2	2	0.94	0.32	0.94
(1,283)	1:682:A:LEU:HD22	1:674:A:MET:HB2	2	0.9	0.57	0.9
(1,283)	1:682:A:LEU:HD21	1:674:A:MET:HB2	2	0.9	0.57	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

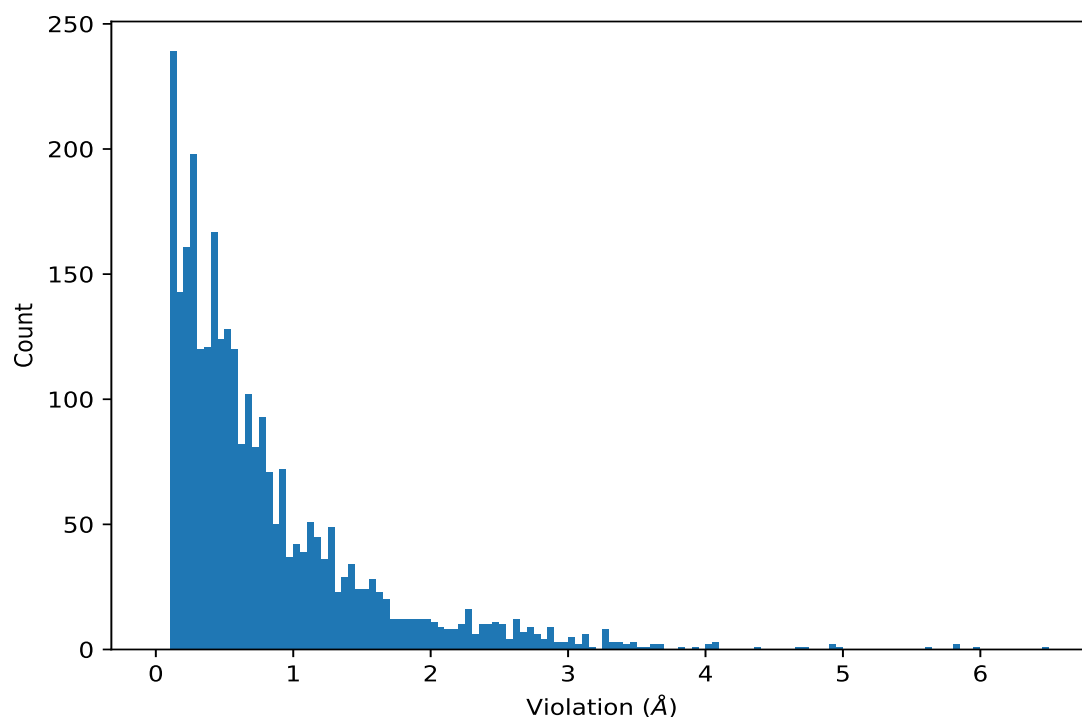
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,346)	1:696:A:ALA:HB1	1:668:A:LEU:HD23	2	0.84	0.0	0.84
(1,346)	1:696:A:ALA:HB3	1:668:A:LEU:HD21	2	0.84	0.0	0.84
(1,468)	1:663:A:PRO:HD3	1:659:A:MET:HA	2	0.84	0.32	0.84
(1,242)	1:675:A:LEU:HD23	1:672:A:ALA:HA	2	0.76	0.08	0.76
(1,242)	1:675:A:LEU:HD21	1:672:A:ALA:HA	2	0.76	0.08	0.76
(3,130)	1:634:A:TRP:HB2	1:636:A:GLU:HB2	2	0.72	0.03	0.72
(3,173)	1:650:A:CYS:HB2	1:648:A:THR:HG22	2	0.68	0.46	0.68
(1,997)	1:643:A:THR:H	1:643:A:THR:HG22	2	0.68	0.1	0.68
(1,997)	1:643:A:THR:H	1:643:A:THR:HG23	2	0.68	0.1	0.68
(1,147)	1:684:A:LYS:HE2	1:677:A:THR:HA	2	0.67	0.37	0.67
(1,243)	1:675:A:LEU:HD21	1:671:A:GLU:HG3	2	0.66	0.05	0.66
(1,243)	1:675:A:LEU:HD22	1:671:A:GLU:HG3	2	0.66	0.05	0.66
(1,116)	1:678:A:GLY:HA2	1:684:A:LYS:HD2	2	0.6	0.07	0.6
(1,754)	1:685:A:ASP:H	1:675:A:LEU:HD13	2	0.54	0.15	0.54
(1,754)	1:685:A:ASP:H	1:675:A:LEU:HD11	2	0.54	0.15	0.54
(1,852)	1:636:A:GLU:H	1:635:A:LEU:HB2	2	0.46	0.09	0.46
(1,615)	1:644:A:ALA:H	1:645:A:LEU:H	2	0.45	0.35	0.45
(1,798)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HA	2	0.41	0.27	0.41
(3,326)	1:643:A:THR:H	1:642:A:ASN:H	2	0.36	0.09	0.36
(1,81)	1:659:A:MET:HA	1:659:A:MET:HG3	2	0.34	0.0	0.34
(1,1012)	1:704:A:MET:H	1:704:A:MET:HG2	2	0.34	0.04	0.34
(1,88)	1:672:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD21	2	0.32	0.03	0.32
(1,88)	1:672:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD22	2	0.32	0.03	0.32
(1,829)	1:668:A:LEU:H	1:668:A:LEU:HD11	2	0.3	0.04	0.3
(1,314)	1:634:A:TRP:HE3	1:637:A:ALA:HB1	2	0.22	0.01	0.22
(3,88)	1:703:A:ALA:HB3	1:704:A:MET:HB2	2	0.22	0.12	0.22
(1,1005)	1:689:A:SER:H	1:684:A:LYS:HA	2	0.2	0.08	0.2
(1,781)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HG2	2	0.16	0.02	0.16
(1,1027)	1:678:A:GLY:H	1:679:A:GLY:HA2	2	0.14	0.01	0.14
(1,834)	1:711:A:GLN:H	1:710:A:ASN:HB2	2	0.13	0.02	0.13
(1,734)	1:634:A:TRP:H	1:633:A:ASP:HB2	2	0.12	0.02	0.12
(1,1168)	1:655:A:GLU:H	1:656:A:TYR:H	2	0.12	0.02	0.12
(1,255)	1:645:A:LEU:HD11	1:645:A:LEU:HA	2	0.11	0.0	0.11
(1,255)	1:645:A:LEU:HD12	1:645:A:LEU:HA	2	0.11	0.0	0.11
(1,252)	1:668:A:LEU:HD21	1:668:A:LEU:HG	2	0.11	0.0	0.11
(1,252)	1:668:A:LEU:HD23	1:668:A:LEU:HG	2	0.11	0.0	0.11

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,301)	1:643:A:THR:HG21	1:646:A:GLU:HG2	14	6.46
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB1	15	5.95
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB1	15	5.84
(1,319)	1:644:A:ALA:HB1	1:718:A:GLU:HB2	15	5.84
(1,301)	1:643:A:THR:HG23	1:646:A:GLU:HG2	17	5.64
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:701:A:MET:HE2	6	4.97
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:717:A:GLU:HG2	4	4.91
(1,320)	1:721:A:ALA:HB1	1:644:A:ALA:HB1	15	4.9
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	11	4.74
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:717:A:GLU:HG2	13	4.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD13	14	4.36
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	17	4.1
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HG3	4	4.09
(1,524)	1:635:A:LEU:HD11	1:706:A:GLY:HA3	19	4.05
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	20	4.04
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD12	2	4.04
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	10	3.94
(3,75)	1:628:A:PRO:HG2	1:657:A:ASP:HB2	11	3.84
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	18	3.67
(1,301)	1:643:A:THR:HG21	1:646:A:GLU:HG2	18	3.66
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	11	3.63
(3,13)	1:695:A:GLN:HA	1:692:A:LEU:HD11	8	3.61
(1,260)	1:682:A:LEU:HD11	1:674:A:MET:HE1	1	3.57
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	13	3.51
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE3	2	3.48
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	12	3.47
(1,421)	1:708:A:LEU:HD11	1:711:A:GLN:HB2	4	3.46
(1,276)	1:708:A:LEU:HD12	1:666:A:MET:HG2	6	3.44
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:646:A:GLU:HB2	13	3.43
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	6	3.39
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	13	3.38
(1,502)	1:659:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	12	3.37
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	20	3.34
(1,503)	1:666:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	17	3.32
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	14	3.32
(3,85)	1:694:A:THR:HG21	1:668:A:LEU:HB3	6	3.3
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE3	18	3.29
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:701:A:MET:HE1	8	3.28
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE3	10	3.28
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD13	5	3.26
(1,351)	1:659:A:MET:HE2	1:662:A:GLU:HA	18	3.26
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG22	6	3.25
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	8	3.25
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:700:A:ALA:HB2	5	3.19
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:638:A:LEU:HD23	17	3.14
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	8	3.13
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD12	13	3.12
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD13	19	3.11
(3,89)	1:709:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	5	3.1
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:668:A:LEU:HB3	10	3.1
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	6	3.08
(1,253)	1:634:A:TRP:HZ2	1:635:A:LEU:HD12	2	3.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,421)	1:708:A:LEU:HD12	1:711:A:GLN:HB2	20	3.05
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	18	3.05
(3,93)	1:637:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD13	11	3.02
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	18	3.02
(3,89)	1:709:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	6	3.0
(1,489)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HG3	8	2.97
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	1	2.96
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	8	2.95
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	11	2.94
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG21	10	2.92
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	17	2.91
(3,89)	1:709:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	14	2.9
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE1	7	2.9
(1,503)	1:666:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	14	2.89
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD22	14	2.88
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG21	1	2.87
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	16	2.86
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	5	2.86
(3,89)	1:709:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	20	2.85
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB3	20	2.85
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG21	8	2.84
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB3	17	2.84
(3,93)	1:637:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD13	13	2.81
(1,497)	1:666:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	10	2.81
(3,93)	1:637:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD13	16	2.8
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	8	2.78
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	20	2.78
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	10	2.78
(3,89)	1:709:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	4	2.77
(1,362)	1:667:A:MET:HE1	1:668:A:LEU:HD12	6	2.75
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD12	6	2.74
(1,497)	1:666:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	17	2.74
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD11	7	2.73
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	5	2.73
(3,93)	1:637:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD12	4	2.72
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD11	17	2.72
(3,93)	1:637:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD13	2	2.7
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	2	2.7
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	5	2.7
(1,524)	1:635:A:LEU:HD11	1:706:A:GLY:HA3	17	2.69
(1,524)	1:635:A:LEU:HD12	1:706:A:GLY:HA3	2	2.68
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	18	2.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	3	2.67
(1,273)	1:712:A:TYR:HE2	1:708:A:LEU:HD13	6	2.67
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	20	2.66
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	10	2.66
(3,92)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HG	13	2.65
(3,13)	1:695:A:GLN:HA	1:638:A:LEU:HD21	14	2.64
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	4	2.64
(1,418)	1:635:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HZ2	9	2.64
(1,1)	1:659:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	18	2.64
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	13	2.63
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB1	7	2.63
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	6	2.63
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD11	12	2.62
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	10	2.61
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	20	2.6
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE3	12	2.6
(3,92)	1:637:A:ALA:HB3	1:635:A:LEU:HG	16	2.59
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:638:A:LEU:HA	5	2.58
(1,251)	1:668:A:LEU:HD23	1:664:A:ARG:HD2	18	2.58
(3,93)	1:637:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD13	10	2.56
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:692:A:LEU:HG	12	2.55
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:692:A:LEU:HG	4	2.54
(3,85)	1:694:A:THR:HG22	1:692:A:LEU:HG	7	2.54
(3,85)	1:694:A:THR:HG21	1:692:A:LEU:HG	17	2.54
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	3	2.53
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB2	13	2.53
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	15	2.53
(3,124)	1:635:A:LEU:HD23	1:638:A:LEU:HA	12	2.52
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD12	8	2.51
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD12	17	2.5
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	3	2.49
(1,319)	1:644:A:ALA:HB3	1:718:A:GLU:HB2	14	2.49
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	14	2.49
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	14	2.48
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	19	2.48
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	11	2.47
(1,361)	1:663:A:PRO:HB3	1:659:A:MET:HE3	18	2.47
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD12	19	2.46
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	8	2.45
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	2	2.45
(1,271)	1:665:A:TYR:HD2	1:708:A:LEU:HD13	6	2.45
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	13	2.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD22	7	2.44
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	10	2.44
(3,85)	1:694:A:THR:HG21	1:692:A:LEU:HG	18	2.43
(3,85)	1:694:A:THR:HG21	1:692:A:LEU:HG	19	2.43
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	4	2.43
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	14	2.43
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD21	10	2.42
(3,93)	1:637:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD12	20	2.41
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	13	2.41
(3,121)	1:709:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD22	6	2.4
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	16	2.4
(3,85)	1:694:A:THR:HG21	1:692:A:LEU:HG	9	2.39
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	4	2.39
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD22	16	2.39
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB3	16	2.39
(1,301)	1:643:A:THR:HG22	1:646:A:GLU:HG2	4	2.39
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD21	11	2.37
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	12	2.36
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	17	2.36
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	3	2.34
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD13	12	2.33
(3,124)	1:635:A:LEU:HD23	1:638:A:LEU:HA	14	2.32
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG21	4	2.32
(1,250)	1:692:A:LEU:HD13	1:672:A:ALA:HA	7	2.32
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	15	2.31
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD22	20	2.3
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	6	2.29
(1,53)	1:636:A:GLU:HA	1:640:A:TRP:HD1	7	2.29
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	19	2.28
(1,14)	1:628:A:PRO:HA	1:631:A:CYS:HB2	18	2.28
(1,527)	1:637:A:ALA:HB1	1:633:A:ASP:HB2	16	2.27
(1,277)	1:708:A:LEU:HD11	1:707:A:ARG:HG3	20	2.27
(3,85)	1:694:A:THR:HG23	1:692:A:LEU:HG	1	2.26
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE1	6	2.26
(1,288)	1:692:A:LEU:HD21	1:695:A:GLN:HG2	7	2.26
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD12	3	2.25
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	5	2.25
(1,421)	1:708:A:LEU:HD13	1:711:A:GLN:HB2	1	2.25
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	13	2.25
(1,277)	1:708:A:LEU:HD12	1:707:A:ARG:HG3	4	2.25
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	14	2.25
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:646:A:GLU:HB2	1	2.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB3	11	2.24
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG23	14	2.24
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	9	2.24
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HE2	6	2.23
(1,319)	1:644:A:ALA:HB3	1:718:A:GLU:HB2	17	2.23
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	8	2.23
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE3	15	2.22
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	9	2.21
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD22	1	2.21
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:714:A:GLN:HB3	18	2.19
(1,1230)	1:654:A:GLY:H	1:651:A:ASP:HB3	1	2.19
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD21	7	2.19
(1,416)	1:635:A:LEU:HD23	1:632:A:GLN:HB2	10	2.19
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	1	2.18
(1,300)	1:677:A:THR:HG22	1:673:A:GLU:HG3	15	2.18
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD13	14	2.17
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG21	4	2.15
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	13	2.14
(1,992)	1:687:A:GLN:HE22	1:720:A:TRP:HZ2	20	2.14
(1,434)	1:682:A:LEU:HG	1:671:A:GLU:HA	14	2.14
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	19	2.13
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	14	2.13
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE1	12	2.13
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD12	9	2.11
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	3	2.1
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD12	3	2.09
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	6	2.09
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	3	2.08
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD21	6	2.07
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG21	2	2.07
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	6	2.07
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:701:A:MET:HE1	4	2.06
(3,87)	1:709:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HE2	8	2.06
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	13	2.06
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	4	2.05
(3,161)	1:632:A:GLN:HG3	1:635:A:LEU:HD11	16	2.04
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD13	6	2.03
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG23	17	2.03
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	10	2.02
(1,249)	1:696:A:ALA:HA	1:668:A:LEU:HD23	17	2.02
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	3	2.01
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	2	2.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	5	2.01
(1,249)	1:696:A:ALA:HA	1:668:A:LEU:HD21	6	2.01
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	11	2.0
(3,124)	1:635:A:LEU:HD23	1:638:A:LEU:HA	20	1.99
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	9	1.99
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE3	1	1.99
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	12	1.99
(1,524)	1:635:A:LEU:HD12	1:706:A:GLY:HA3	9	1.98
(1,245)	1:675:A:LEU:HD21	1:672:A:ALA:HB1	4	1.98
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	18	1.97
(1,319)	1:644:A:ALA:HB2	1:718:A:GLU:HB2	20	1.97
(1,300)	1:677:A:THR:HG23	1:673:A:GLU:HG3	6	1.97
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:678:A:GLY:HA2	16	1.96
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG21	3	1.96
(1,246)	1:692:A:LEU:HD12	1:671:A:GLU:HB2	7	1.96
(3,92)	1:637:A:ALA:HB3	1:643:A:THR:HG22	7	1.95
(3,28)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HB2	1	1.95
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:638:A:LEU:HA	3	1.94
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	19	1.94
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD21	6	1.93
(1,508)	1:625:A:HIS:HB3	1:656:A:TYR:HD2	10	1.93
(1,355)	1:674:A:MET:HE3	1:671:A:GLU:HA	8	1.93
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	5	1.93
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:638:A:LEU:HA	1	1.92
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	17	1.91
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	8	1.91
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	18	1.91
(3,87)	1:709:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HE2	13	1.9
(1,419)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HB2	4	1.89
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB3	19	1.88
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD12	1	1.88
(1,523)	1:635:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HZ3	17	1.88
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB2	2	1.88
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	4	1.88
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD23	14	1.87
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	12	1.87
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	16	1.86
(1,355)	1:674:A:MET:HE2	1:671:A:GLU:HA	4	1.86
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG23	19	1.85
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	7	1.84
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	1	1.84
(1,278)	1:675:A:LEU:HA	1:675:A:LEU:HD13	18	1.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,131)	1:638:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HB2	18	1.82
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD21	18	1.82
(1,248)	1:665:A:TYR:HA	1:668:A:LEU:HD22	17	1.82
(1,245)	1:675:A:LEU:HD23	1:672:A:ALA:HB3	18	1.81
(3,161)	1:632:A:GLN:HG3	1:635:A:LEU:HD13	7	1.8
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	15	1.8
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	15	1.8
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG21	20	1.8
(1,138)	1:684:A:LYS:HE2	1:686:A:PRO:HG3	11	1.8
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB1	14	1.79
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD11	2	1.79
(1,523)	1:635:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HZ3	15	1.79
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	9	1.79
(1,278)	1:675:A:LEU:HA	1:675:A:LEU:HD11	4	1.79
(3,121)	1:709:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD21	10	1.78
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	5	1.78
(1,272)	1:665:A:TYR:HE2	1:708:A:LEU:HD12	6	1.78
(3,87)	1:709:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HE2	9	1.77
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE1	14	1.77
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	15	1.75
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	3	1.75
(3,92)	1:637:A:ALA:HB1	1:648:A:THR:HG21	2	1.74
(2,7)	1:651:A:ASP:H	1:649:A:ASP:HB3	17	1.74
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE1	2	1.74
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	16	1.74
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	10	1.73
(3,161)	1:632:A:GLN:HG3	1:635:A:LEU:HD13	19	1.72
(3,87)	1:709:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HE2	3	1.72
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD12	13	1.72
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	19	1.72
(1,275)	1:708:A:LEU:HA	1:708:A:LEU:HD11	4	1.72
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE2	9	1.71
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	19	1.71
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	12	1.7
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB2	1	1.69
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	10	1.69
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	18	1.69
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	16	1.69
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	2	1.68
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	13	1.68
(3,169)	1:673:A:GLU:HA	1:715:A:LYS:HD3	14	1.67
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD12	9	1.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE3	19	1.67
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	14	1.67
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	8	1.67
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	11	1.67
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	15	1.67
(3,124)	1:635:A:LEU:HD23	1:638:A:LEU:HA	18	1.66
(3,87)	1:709:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HE2	5	1.66
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD22	18	1.66
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE3	5	1.66
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	8	1.66
(1,301)	1:643:A:THR:HG23	1:646:A:GLU:HG2	10	1.66
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	9	1.64
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	1	1.64
(1,503)	1:666:A:MET:HE3	1:705:A:LYS:HE2	3	1.64
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB2	17	1.64
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	1	1.64
(1,333)	1:716:A:ALA:HB2	1:715:A:LYS:HD2	1	1.64
(1,275)	1:708:A:LEU:HA	1:708:A:LEU:HD13	1	1.64
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	9	1.63
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	16	1.63
(1,992)	1:687:A:GLN:HE22	1:720:A:TRP:HZ2	18	1.63
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	5	1.63
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	10	1.63
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:717:A:GLU:HG2	6	1.62
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:678:A:GLY:HA2	12	1.62
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	17	1.62
(1,287)	1:692:A:LEU:HA	1:692:A:LEU:HD21	7	1.62
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	1	1.61
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	20	1.61
(1,279)	1:645:A:LEU:HA	1:645:A:LEU:HD21	20	1.61
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:665:A:TYR:HB3	5	1.6
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:665:A:TYR:HB3	9	1.6
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	15	1.6
(1,367)	1:720:A:TRP:HA	1:723:A:MET:HE2	1	1.6
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE1	1	1.59
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	11	1.58
(3,124)	1:635:A:LEU:HD22	1:638:A:LEU:HA	4	1.58
(1,527)	1:637:A:ALA:HB1	1:633:A:ASP:HB2	6	1.58
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	7	1.58
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	18	1.58
(1,279)	1:645:A:LEU:HA	1:645:A:LEU:HD21	10	1.58
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	14	1.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,419)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HB2	11	1.57
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	8	1.57
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	5	1.57
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG23	7	1.57
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	14	1.57
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD13	5	1.57
(1,1)	1:659:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	3	1.57
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	14	1.56
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:638:A:LEU:HD21	18	1.56
(1,1)	1:659:A:MET:HE3	1:663:A:PRO:HA	19	1.56
(3,80)	1:708:A:LEU:HD12	1:665:A:TYR:HB3	7	1.55
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:638:A:LEU:HD21	4	1.55
(1,515)	1:637:A:ALA:HB2	1:636:A:GLU:HB2	9	1.55
(1,514)	1:637:A:ALA:HB2	1:634:A:TRP:HZ3	5	1.55
(1,419)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HB2	16	1.55
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	5	1.55
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	12	1.55
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	13	1.55
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	2	1.55
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	7	1.55
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	18	1.54
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE1	14	1.54
(1,333)	1:716:A:ALA:HB3	1:715:A:LYS:HD2	16	1.54
(1,275)	1:708:A:LEU:HA	1:708:A:LEU:HD12	20	1.54
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	20	1.53
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	11	1.53
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	6	1.52
(1,992)	1:687:A:GLN:HE22	1:720:A:TRP:HZ2	5	1.52
(1,419)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HB2	17	1.52
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	11	1.52
(1,301)	1:643:A:THR:HG23	1:646:A:GLU:HG2	6	1.52
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	16	1.52
(1,248)	1:665:A:TYR:HA	1:668:A:LEU:HD23	6	1.52
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	11	1.52
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	5	1.51
(1,502)	1:659:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	11	1.51
(1,490)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HD2	4	1.51
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	17	1.51
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	6	1.51
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	11	1.51
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	8	1.5
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	1	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,515)	1:637:A:ALA:HB1	1:636:A:GLU:HB2	6	1.5
(1,419)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HB2	14	1.5
(3,121)	1:709:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD23	3	1.49
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HE2	10	1.49
(1,503)	1:666:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	10	1.49
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	19	1.49
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	20	1.49
(1,292)	1:713:A:TYR:HE2	1:694:A:THR:HG22	6	1.49
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	13	1.48
(1,503)	1:666:A:MET:HE3	1:705:A:LYS:HE2	7	1.48
(1,503)	1:666:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	15	1.48
(1,496)	1:716:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	6	1.48
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE1	7	1.48
(1,419)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HB2	5	1.48
(1,323)	1:713:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB3	6	1.48
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE1	14	1.48
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	20	1.47
(3,80)	1:708:A:LEU:HD12	1:665:A:TYR:HB3	11	1.47
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	1	1.47
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	4	1.47
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	8	1.47
(1,283)	1:682:A:LEU:HD21	1:674:A:MET:HB2	14	1.47
(1,515)	1:637:A:ALA:HB3	1:636:A:GLU:HB2	2	1.46
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	4	1.46
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	17	1.46
(1,323)	1:713:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB3	12	1.46
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	12	1.45
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	18	1.45
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB3	14	1.45
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	9	1.45
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	14	1.44
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	6	1.44
(3,80)	1:708:A:LEU:HD12	1:665:A:TYR:HB3	2	1.44
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	9	1.44
(1,503)	1:666:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	1	1.44
(1,497)	1:666:A:MET:HE3	1:663:A:PRO:HA	3	1.44
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE2	9	1.44
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	3	1.44
(1,250)	1:692:A:LEU:HD11	1:672:A:ALA:HA	10	1.44
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	16	1.43
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	7	1.43
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	10	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	16	1.43
(1,387)	1:664:A:ARG:HA	1:663:A:PRO:HG3	6	1.43
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	12	1.43
(3,44)	1:688:A:ARG:HD2	1:692:A:LEU:HD22	18	1.42
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	1	1.42
(1,416)	1:635:A:LEU:HD22	1:632:A:GLN:HB2	2	1.42
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	11	1.42
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	4	1.42
(1,251)	1:668:A:LEU:HD21	1:664:A:ARG:HD2	5	1.42
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	18	1.41
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	1	1.41
(3,91)	1:669:A:ALA:HB2	1:667:A:MET:HB2	17	1.41
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	10	1.41
(1,515)	1:637:A:ALA:HB2	1:636:A:GLU:HB2	19	1.41
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE2	11	1.41
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	9	1.41
(1,333)	1:716:A:ALA:HB3	1:715:A:LYS:HD2	14	1.41
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	5	1.41
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	8	1.4
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	12	1.4
(1,497)	1:666:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	14	1.4
(1,496)	1:716:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	12	1.4
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB3	3	1.4
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:638:A:LEU:HA	11	1.39
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	19	1.39
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB2	7	1.39
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	1	1.39
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	15	1.39
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	3	1.38
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	15	1.38
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	6	1.38
(1,333)	1:716:A:ALA:HB2	1:715:A:LYS:HD2	9	1.38
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	1	1.38
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HB2	14	1.37
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE1	4	1.37
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	19	1.37
(3,374)	1:672:A:ALA:H	1:675:A:LEU:HD22	4	1.36
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	17	1.36
(2,3)	1:722:A:GLN:HG3	1:724:A:GLU:HG2	14	1.36
(1,1231)	1:656:A:TYR:H	1:626:A:MET:HB3	18	1.36
(1,514)	1:637:A:ALA:HB2	1:634:A:TRP:HZ3	13	1.36
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE3	16	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,335)	1:697:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	13	1.36
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	8	1.36
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HA	14	1.35
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE2	12	1.35
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	6	1.35
(3,92)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HG	12	1.34
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	4	1.34
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	5	1.34
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD11	19	1.34
(1,251)	1:668:A:LEU:HD22	1:664:A:ARG:HD2	6	1.34
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	7	1.33
(1,837)	1:646:A:GLU:H	1:645:A:LEU:H	17	1.33
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB3	4	1.33
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	15	1.33
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	18	1.33
(3,92)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HG	18	1.32
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD12	4	1.32
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	20	1.32
(1,419)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HB2	3	1.32
(1,279)	1:645:A:LEU:HA	1:645:A:LEU:HD22	16	1.32
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	20	1.32
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	11	1.31
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	7	1.31
(1,250)	1:692:A:LEU:HD11	1:672:A:ALA:HA	6	1.31
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	8	1.3
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	15	1.3
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE1	2	1.3
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	1	1.3
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HB2	7	1.29
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	10	1.29
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	14	1.29
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE2	15	1.29
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	8	1.29
(1,419)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HB2	20	1.29
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	3	1.29
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	17	1.29
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:665:A:TYR:HB3	3	1.28
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	4	1.28
(1,281)	1:675:A:LEU:HD13	1:685:A:ASP:HB2	18	1.28
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	6	1.28
(1,251)	1:668:A:LEU:HD22	1:664:A:ARG:HD2	3	1.28
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	1	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,123)	1:635:A:LEU:HD22	1:634:A:TRP:HA	5	1.27
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	6	1.27
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB2	2	1.27
(3,46)	1:684:A:LYS:HE2	1:686:A:PRO:HG2	11	1.27
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	5	1.27
(1,576)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HE2	11	1.27
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB3	11	1.27
(1,421)	1:708:A:LEU:HD11	1:711:A:GLN:HB2	6	1.27
(1,416)	1:635:A:LEU:HD21	1:632:A:GLN:HB2	8	1.27
(1,335)	1:697:A:ALA:HB2	1:713:A:TYR:HE2	3	1.27
(1,254)	1:682:A:LEU:HD12	1:682:A:LEU:HA	14	1.27
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	5	1.27
(3,123)	1:635:A:LEU:HD22	1:634:A:TRP:HA	11	1.26
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HA	12	1.26
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	11	1.26
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	15	1.26
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	11	1.26
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	12	1.26
(1,534)	1:641:A:TYR:HD2	1:643:A:THR:HG22	6	1.26
(1,534)	1:641:A:TYR:HD2	1:643:A:THR:HG23	14	1.26
(1,290)	1:692:A:LEU:HD23	1:692:A:LEU:HB2	3	1.26
(1,290)	1:692:A:LEU:HD23	1:692:A:LEU:HB2	11	1.26
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	11	1.26
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	9	1.26
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	9	1.25
(3,89)	1:709:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HG3	11	1.25
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	3	1.25
(1,1229)	1:654:A:GLY:H	1:651:A:ASP:HA	11	1.25
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	2	1.25
(1,290)	1:692:A:LEU:HD22	1:692:A:LEU:HB2	4	1.25
(1,290)	1:692:A:LEU:HD23	1:692:A:LEU:HB2	9	1.25
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	19	1.25
(1,282)	1:675:A:LEU:HD13	1:685:A:ASP:HB3	18	1.25
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	7	1.25
(1,138)	1:684:A:LYS:HE2	1:686:A:PRO:HG3	12	1.25
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HA	20	1.24
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	4	1.24
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	15	1.24
(1,333)	1:716:A:ALA:HB2	1:715:A:LYS:HD2	7	1.24
(1,290)	1:692:A:LEU:HD23	1:692:A:LEU:HB2	1	1.24
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	8	1.24
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	12	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,290)	1:692:A:LEU:HD22	1:692:A:LEU:HB2	13	1.24
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	16	1.24
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	18	1.24
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	18	1.24
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	13	1.24
(3,92)	1:637:A:ALA:HB3	1:635:A:LEU:HG	20	1.23
(3,91)	1:669:A:ALA:HB3	1:667:A:MET:HB2	13	1.23
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:665:A:TYR:HB3	15	1.23
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD12	17	1.23
(1,524)	1:635:A:LEU:HD13	1:706:A:GLY:HA3	15	1.23
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE3	20	1.23
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	17	1.23
(1,290)	1:692:A:LEU:HD22	1:692:A:LEU:HB2	20	1.23
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	19	1.23
(1,803)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HB3	11	1.22
(1,290)	1:692:A:LEU:HD23	1:692:A:LEU:HB2	14	1.22
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	16	1.22
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	18	1.22
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	16	1.22
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE2	9	1.22
(3,121)	1:709:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD12	4	1.21
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	7	1.21
(1,1231)	1:656:A:TYR:H	1:626:A:MET:HB3	15	1.21
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	15	1.21
(1,571)	1:712:A:TYR:HD2	1:708:A:LEU:HD13	6	1.21
(1,497)	1:666:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	13	1.21
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	1	1.21
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	2	1.21
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	20	1.21
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	19	1.2
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	19	1.2
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	1	1.2
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	2	1.2
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	9	1.2
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	2	1.2
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	8	1.19
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	14	1.19
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	17	1.19
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:667:A:MET:HB2	9	1.19
(1,515)	1:637:A:ALA:HB2	1:636:A:GLU:HB2	1	1.19
(1,498)	1:659:A:MET:HG2	1:659:A:MET:HE1	16	1.19
(1,489)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HG3	3	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,374)	1:672:A:ALA:H	1:675:A:LEU:HD21	18	1.18
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:637:A:ALA:HA	19	1.18
(3,121)	1:709:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD22	8	1.18
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	3	1.18
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	20	1.18
(3,91)	1:669:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HB2	2	1.18
(1,1203)	1:642:A:ASN:H	1:640:A:TRP:HA	8	1.18
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD21	20	1.18
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD12	1	1.18
(1,395)	1:669:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD22	5	1.18
(1,376)	1:672:A:ALA:HB2	1:692:A:LEU:HD22	15	1.18
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB1	10	1.18
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	14	1.18
(1,241)	1:675:A:LEU:HD22	1:671:A:GLU:HA	4	1.18
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	17	1.18
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	20	1.17
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	19	1.17
(1,890)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HG2	10	1.17
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD13	14	1.17
(1,498)	1:659:A:MET:HG2	1:659:A:MET:HE2	12	1.17
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB2	10	1.17
(1,333)	1:716:A:ALA:HB3	1:715:A:LYS:HD2	13	1.17
(1,323)	1:713:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB2	16	1.17
(3,99)	1:663:A:PRO:HB3	1:708:A:LEU:HB3	6	1.16
(1,1231)	1:656:A:TYR:H	1:626:A:MET:HB3	4	1.16
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	8	1.16
(1,468)	1:663:A:PRO:HD3	1:659:A:MET:HA	18	1.16
(1,416)	1:635:A:LEU:HD21	1:632:A:GLN:HB2	15	1.16
(1,292)	1:713:A:TYR:HE2	1:694:A:THR:HG23	12	1.16
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG22	9	1.16
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	5	1.16
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	8	1.16
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	9	1.15
(3,173)	1:650:A:CYS:HB2	1:648:A:THR:HG22	10	1.15
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	18	1.15
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD22	8	1.15
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD13	9	1.15
(1,292)	1:713:A:TYR:HE2	1:694:A:THR:HG21	16	1.15
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	1	1.15
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	16	1.15
(3,137)	1:722:A:GLN:HG2	1:725:A:GLU:HB2	2	1.14
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	4	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	13	1.14
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	2	1.14
(3,28)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HB2	3	1.14
(1,837)	1:646:A:GLU:H	1:645:A:LEU:H	11	1.14
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	3	1.14
(1,490)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HD2	17	1.14
(1,311)	1:703:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HB3	16	1.14
(1,250)	1:692:A:LEU:HD11	1:672:A:ALA:HA	5	1.14
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	8	1.14
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:703:A:ALA:HB3	10	1.13
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	5	1.13
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	9	1.13
(1,1234)	1:659:A:MET:H	1:657:A:ASP:HB2	12	1.13
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	5	1.13
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	1	1.13
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	4	1.13
(1,64)	1:668:A:LEU:HA	1:668:A:LEU:HD13	17	1.13
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	19	1.12
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	14	1.12
(3,164)	1:719:A:ALA:HB2	1:717:A:GLU:HG2	5	1.12
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:665:A:TYR:HB3	17	1.12
(3,75)	1:628:A:PRO:HG2	1:657:A:ASP:HB2	12	1.12
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	1	1.12
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	8	1.12
(1,1203)	1:642:A:ASN:H	1:640:A:TRP:HA	1	1.12
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD22	5	1.12
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	10	1.12
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	8	1.12
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	12	1.12
(1,207)	1:701:A:MET:HB2	1:709:A:ALA:HA	2	1.12
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	7	1.11
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	20	1.11
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	12	1.11
(1,333)	1:716:A:ALA:HB2	1:715:A:LYS:HD2	20	1.11
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	8	1.11
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	1	1.11
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	13	1.1
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD22	8	1.1
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	12	1.1
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	7	1.1
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	20	1.1
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	7	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,524)	1:635:A:LEU:HD13	1:706:A:GLY:HA3	8	1.09
(1,488)	1:665:A:TYR:HB3	1:668:A:LEU:HD21	17	1.09
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	3	1.09
(1,64)	1:668:A:LEU:HA	1:668:A:LEU:HD13	6	1.09
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	1	1.08
(3,137)	1:722:A:GLN:HG2	1:725:A:GLU:HB2	8	1.08
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB2	9	1.08
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	17	1.08
(1,417)	1:635:A:LEU:HD23	1:636:A:GLU:HG2	2	1.08
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	11	1.08
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:717:A:GLU:HG2	18	1.07
(3,164)	1:719:A:ALA:HB2	1:685:A:ASP:HB3	2	1.07
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HA	18	1.07
(3,80)	1:708:A:LEU:HD12	1:705:A:LYS:HE2	19	1.07
(1,422)	1:635:A:LEU:HD12	1:636:A:GLU:HB2	13	1.07
(1,422)	1:635:A:LEU:HD12	1:636:A:GLU:HB2	16	1.07
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	19	1.07
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	19	1.06
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG23	17	1.06
(3,89)	1:709:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HG3	19	1.06
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	10	1.06
(1,514)	1:637:A:ALA:HB2	1:634:A:TRP:HZ3	12	1.06
(1,497)	1:666:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	1	1.06
(1,430)	1:708:A:LEU:HG	1:705:A:LYS:HB2	6	1.06
(1,414)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HG3	8	1.06
(1,377)	1:700:A:ALA:HB2	1:708:A:LEU:HD13	10	1.06
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	13	1.06
(1,282)	1:675:A:LEU:HD11	1:685:A:ASP:HB3	4	1.06
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	4	1.06
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	10	1.06
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	15	1.05
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	1	1.05
(3,89)	1:709:A:ALA:HB2	1:711:A:GLN:HG3	9	1.05
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	7	1.05
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	5	1.05
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	14	1.05
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	2	1.05
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	14	1.05
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	2	1.04
(3,164)	1:719:A:ALA:HB3	1:685:A:ASP:HB3	13	1.04
(3,104)	1:673:A:GLU:HA	1:692:A:LEU:HD23	7	1.04
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	17	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	2	1.04
(1,514)	1:637:A:ALA:HB3	1:634:A:TRP:HZ3	4	1.04
(1,417)	1:635:A:LEU:HD22	1:636:A:GLU:HG2	1	1.04
(1,376)	1:672:A:ALA:HB3	1:692:A:LEU:HD21	5	1.04
(1,147)	1:684:A:LYS:HE2	1:677:A:THR:HA	20	1.04
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE1	20	1.03
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	1	1.03
(1,514)	1:637:A:ALA:HB3	1:634:A:TRP:HZ3	11	1.03
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD11	8	1.03
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	19	1.03
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD23	11	1.03
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	16	1.02
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	10	1.02
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	16	1.02
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	6	1.02
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD13	4	1.02
(1,496)	1:716:A:ALA:HB2	1:713:A:TYR:HE2	16	1.02
(1,417)	1:635:A:LEU:HD23	1:636:A:GLU:HG2	6	1.02
(1,212)	1:683:A:GLU:HB3	1:684:A:LYS:HG3	3	1.02
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE2	1	1.01
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	15	1.01
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	16	1.01
(1,523)	1:635:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HZ3	10	1.01
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD12	11	1.01
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	12	1.01
(1,286)	1:675:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HG2	8	1.01
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE1	6	1.01
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	1	1.0
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	20	1.0
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD22	9	1.0
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	12	1.0
(1,514)	1:637:A:ALA:HB2	1:634:A:TRP:HZ3	14	1.0
(1,508)	1:625:A:HIS:HB3	1:656:A:TYR:HD2	7	1.0
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	9	1.0
(1,422)	1:635:A:LEU:HD13	1:636:A:GLU:HB2	6	1.0
(1,291)	1:676:A:PHE:HD2	1:677:A:THR:HG23	6	1.0
(1,257)	1:638:A:LEU:HA	1:638:A:LEU:HD11	12	1.0
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	4	1.0
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG23	1	0.99
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	19	0.99
(3,164)	1:719:A:ALA:HB1	1:685:A:ASP:HB3	18	0.99
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	18	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,514)	1:637:A:ALA:HB3	1:634:A:TRP:HZ3	20	0.99
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	6	0.99
(1,362)	1:667:A:MET:HE1	1:668:A:LEU:HD13	16	0.99
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	8	0.99
(1,241)	1:675:A:LEU:HD21	1:671:A:GLU:HA	18	0.99
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:647:A:MET:HG3	2	0.98
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	5	0.98
(1,1231)	1:656:A:TYR:H	1:626:A:MET:HB3	14	0.98
(1,939)	1:723:A:MET:H	1:723:A:MET:HG2	2	0.98
(1,524)	1:635:A:LEU:HD13	1:706:A:GLY:HA3	6	0.98
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	4	0.98
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	4	0.98
(1,490)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HD2	11	0.98
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE2	17	0.98
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	12	0.98
(3,164)	1:719:A:ALA:HB3	1:685:A:ASP:HB3	4	0.97
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB1	20	0.97
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	7	0.97
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	14	0.97
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	11	0.97
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	20	0.97
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	16	0.97
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	9	0.97
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	12	0.96
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	18	0.96
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	3	0.96
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	12	0.96
(1,490)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HD2	13	0.96
(1,422)	1:635:A:LEU:HD11	1:636:A:GLU:HB2	7	0.96
(1,417)	1:635:A:LEU:HD22	1:636:A:GLU:HG2	10	0.96
(1,395)	1:669:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD22	15	0.96
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD12	18	0.96
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	18	0.96
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	5	0.95
(3,170)	1:709:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HB2	16	0.95
(3,164)	1:719:A:ALA:HB2	1:685:A:ASP:HB3	3	0.95
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	18	0.95
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:639:A:HIS:HA	1	0.95
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	11	0.95
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	2	0.95
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	15	0.95
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD23	9	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE3	3	0.94
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG22	10	0.94
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:678:A:GLY:HA2	8	0.94
(3,170)	1:709:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HB2	3	0.94
(3,122)	1:699:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HD2	10	0.94
(3,78)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HB2	15	0.94
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	16	0.94
(3,27)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HG2	11	0.94
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	12	0.94
(1,1235)	1:723:A:MET:H	1:725:A:GLU:HB2	17	0.94
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	20	0.94
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	11	0.94
(1,419)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HB2	13	0.94
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	19	0.94
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	12	0.94
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	3	0.93
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	20	0.93
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:705:A:LYS:HE2	16	0.93
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	14	0.93
(1,1230)	1:654:A:GLY:H	1:651:A:ASP:HB3	11	0.93
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	10	0.93
(1,503)	1:666:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	16	0.93
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	19	0.93
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG22	7	0.92
(3,170)	1:709:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HB2	8	0.92
(3,80)	1:708:A:LEU:HD13	1:665:A:TYR:HB3	12	0.92
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	1	0.92
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	6	0.92
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	13	0.92
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	14	0.92
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB1	3	0.92
(1,414)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HG3	3	0.92
(1,414)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HG3	9	0.92
(1,395)	1:669:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD22	6	0.92
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	3	0.91
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	1	0.91
(3,92)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HG	17	0.91
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	17	0.91
(1,1235)	1:723:A:MET:H	1:725:A:GLU:HB2	13	0.91
(1,1203)	1:642:A:ASN:H	1:640:A:TRP:HA	6	0.91
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	5	0.91
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	20	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD12	16	0.91
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD12	8	0.91
(1,514)	1:637:A:ALA:HB2	1:634:A:TRP:HZ3	2	0.91
(1,362)	1:667:A:MET:HE3	1:668:A:LEU:HD11	19	0.91
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	19	0.91
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	10	0.91
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	14	0.91
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	17	0.9
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HB2	20	0.9
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	8	0.9
(3,123)	1:635:A:LEU:HD22	1:639:A:HIS:HA	4	0.9
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD23	15	0.9
(1,837)	1:646:A:GLU:H	1:645:A:LEU:H	3	0.9
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	17	0.9
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	20	0.9
(1,414)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HG3	14	0.9
(1,362)	1:667:A:MET:HE3	1:668:A:LEU:HD11	10	0.9
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	14	0.9
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	3	0.9
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD12	17	0.9
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	8	0.9
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	1	0.89
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	5	0.89
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB2	2	0.89
(3,123)	1:635:A:LEU:HD21	1:639:A:HIS:HA	3	0.89
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD23	3	0.89
(1,984)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HA	14	0.89
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	10	0.89
(1,514)	1:637:A:ALA:HB2	1:634:A:TRP:HZ3	10	0.89
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	18	0.89
(1,333)	1:716:A:ALA:HB1	1:715:A:LYS:HD2	19	0.89
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD13	19	0.89
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB3	10	0.88
(3,161)	1:632:A:GLN:HG2	1:635:A:LEU:HD12	6	0.88
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	2	0.88
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	15	0.88
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	20	0.88
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	4	0.88
(1,892)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:H	12	0.88
(1,803)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HB3	18	0.88
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	7	0.88
(1,772)	1:655:A:GLU:H	1:655:A:GLU:HB2	11	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	12	0.88
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	19	0.88
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	6	0.88
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	13	0.88
(1,489)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HG3	11	0.88
(1,414)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HG3	16	0.88
(1,414)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HG3	17	0.88
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	18	0.88
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD12	7	0.88
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD22	12	0.88
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD12	1	0.88
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD12	15	0.88
(1,119)	1:688:A:ARG:HD2	1:675:A:LEU:HG	10	0.88
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD13	3	0.87
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HB2	17	0.87
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	9	0.87
(1,277)	1:708:A:LEU:HD12	1:707:A:ARG:HG3	1	0.87
(1,261)	1:638:A:LEU:HB2	1:638:A:LEU:HD13	8	0.87
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	13	0.87
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG22	4	0.86
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	11	0.86
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB2	20	0.86
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG22	2	0.86
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	11	0.86
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	15	0.86
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	19	0.86
(1,305)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HD2	6	0.86
(1,281)	1:675:A:LEU:HD11	1:685:A:ASP:HB2	4	0.86
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	20	0.86
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	18	0.85
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	6	0.85
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	2	0.85
(1,490)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HD2	9	0.85
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	7	0.85
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD11	5	0.85
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE3	5	0.85
(1,302)	1:665:A:TYR:HE2	1:703:A:ALA:HB1	8	0.85
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	17	0.85
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	9	0.85
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	16	0.85
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HB2	11	0.84
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	13	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,75)	1:628:A:PRO:HG2	1:657:A:ASP:HB2	1	0.84
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	8	0.84
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	3	0.84
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	4	0.84
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	8	0.84
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	12	0.84
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	18	0.84
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	19	0.84
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB3	2	0.84
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	9	0.84
(1,489)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HG3	15	0.84
(1,417)	1:635:A:LEU:HD21	1:636:A:GLU:HG2	17	0.84
(1,346)	1:696:A:ALA:HB3	1:668:A:LEU:HD21	6	0.84
(1,346)	1:696:A:ALA:HB1	1:668:A:LEU:HD23	17	0.84
(1,333)	1:716:A:ALA:HB3	1:715:A:LYS:HD2	18	0.84
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	6	0.84
(1,242)	1:675:A:LEU:HD21	1:672:A:ALA:HA	4	0.84
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD23	3	0.84
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	7	0.84
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	5	0.83
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	18	0.83
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	13	0.83
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	14	0.83
(1,972)	1:717:A:GLU:H	1:715:A:LYS:HD2	5	0.83
(1,667)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HG	7	0.83
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	15	0.83
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	5	0.83
(1,489)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HG3	17	0.83
(1,333)	1:716:A:ALA:HB3	1:715:A:LYS:HD2	3	0.83
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	8	0.82
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	14	0.82
(3,122)	1:699:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HD2	4	0.82
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	4	0.82
(1,419)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HB2	12	0.82
(1,414)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HG3	19	0.82
(1,414)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HG3	20	0.82
(1,363)	1:666:A:MET:HE1	1:708:A:LEU:HD12	6	0.82
(1,351)	1:659:A:MET:HE3	1:662:A:GLU:HA	3	0.82
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	13	0.82
(1,251)	1:668:A:LEU:HD22	1:664:A:ARG:HD2	13	0.82
(3,121)	1:709:A:ALA:HB3	1:638:A:LEU:HD23	15	0.81
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	2	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB3	4	0.81
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	16	0.81
(1,524)	1:635:A:LEU:HD11	1:706:A:GLY:HA3	3	0.81
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	1	0.81
(1,488)	1:665:A:TYR:HB3	1:668:A:LEU:HD22	6	0.81
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	4	0.81
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG22	12	0.8
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	19	0.8
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD12	7	0.8
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	5	0.8
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	2	0.8
(1,615)	1:644:A:ALA:H	1:645:A:LEU:H	14	0.8
(1,414)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HG3	11	0.8
(1,353)	1:704:A:MET:HE2	1:704:A:MET:HA	14	0.8
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	9	0.8
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	9	0.8
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	2	0.79
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE3	13	0.79
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD13	4	0.79
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	8	0.79
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	11	0.79
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	12	0.79
(3,92)	1:637:A:ALA:HB2	1:648:A:THR:HG22	14	0.79
(3,92)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HG	15	0.79
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	12	0.79
(1,972)	1:717:A:GLU:H	1:715:A:LYS:HD2	8	0.79
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	18	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	1	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	4	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	6	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	7	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	11	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	15	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	17	0.79
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	20	0.79
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	8	0.79
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	5	0.79
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	12	0.79
(1,414)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HG3	1	0.79
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	6	0.79
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	18	0.79
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	9	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,99)	1:663:A:PRO:HB3	1:708:A:LEU:HB3	20	0.78
(3,89)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HG3	10	0.78
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	10	0.78
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	18	0.78
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	7	0.78
(1,1160)	1:722:A:GLN:H	1:686:A:PRO:HB2	12	0.78
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	2	0.78
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	3	0.78
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	5	0.78
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	13	0.78
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	19	0.78
(1,788)	1:671:A:GLU:H	1:670:A:ARG:HB2	1	0.78
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	3	0.78
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	12	0.78
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	14	0.78
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	16	0.78
(1,414)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HG3	5	0.78
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	13	0.78
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	2	0.78
(1,311)	1:703:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HB3	3	0.78
(1,302)	1:665:A:TYR:HE2	1:703:A:ALA:HB1	6	0.78
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	13	0.78
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	18	0.78
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	6	0.77
(3,80)	1:708:A:LEU:HD13	1:665:A:TYR:HB3	18	0.77
(2,2)	1:691:A:ASP:HB2	1:695:A:GLN:HG2	12	0.77
(1,997)	1:643:A:THR:H	1:643:A:THR:HG22	16	0.77
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	6	0.77
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	8	0.77
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	9	0.77
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	12	0.77
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	14	0.77
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	16	0.77
(1,887)	1:701:A:MET:H	1:701:A:MET:HB2	18	0.77
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	12	0.77
(1,803)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HB3	1	0.77
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	6	0.77
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	17	0.77
(1,520)	1:637:A:ALA:HA	1:638:A:LEU:HD22	18	0.77
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	5	0.77
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB3	7	0.77
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	16	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	19	0.77
(1,489)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HG3	13	0.77
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD11	9	0.77
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD12	13	0.77
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	2	0.77
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	9	0.77
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	16	0.76
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	15	0.76
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HB2	5	0.76
(3,27)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG2	14	0.76
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	18	0.76
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	19	0.76
(1,523)	1:635:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HZ3	8	0.76
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB2	10	0.76
(1,414)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HG3	2	0.76
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD22	17	0.76
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	5	0.75
(3,122)	1:699:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HD2	15	0.75
(3,75)	1:628:A:PRO:HG2	1:657:A:ASP:HB2	8	0.75
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	4	0.75
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD11	11	0.75
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	13	0.75
(1,508)	1:625:A:HIS:HB3	1:656:A:TYR:HD2	9	0.75
(1,305)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HD2	8	0.75
(1,251)	1:668:A:LEU:HD23	1:664:A:ARG:HD2	20	0.75
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	14	0.74
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	16	0.74
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:668:A:LEU:HB3	15	0.74
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	9	0.74
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	13	0.74
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	3	0.74
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:674:A:MET:HA	13	0.74
(3,130)	1:634:A:TRP:HB2	1:636:A:GLU:HB2	2	0.74
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	8	0.74
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	18	0.74
(3,46)	1:684:A:LYS:HE2	1:686:A:PRO:HG2	12	0.74
(2,3)	1:722:A:GLN:HG3	1:724:A:GLU:HG2	1	0.74
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	5	0.74
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	5	0.74
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	15	0.74
(1,803)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HB3	17	0.74
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE1	6	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	8	0.74
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	18	0.74
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	4	0.74
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	16	0.73
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	18	0.73
(3,191)	1:641:A:TYR:HE2	1:643:A:THR:HG22	14	0.73
(3,170)	1:709:A:ALA:HB2	1:711:A:GLN:HB2	9	0.73
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	3	0.73
(3,77)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HA	2	0.73
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	5	0.73
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	15	0.73
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	10	0.73
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	5	0.73
(1,842)	1:645:A:LEU:H	1:644:A:ALA:HB3	15	0.73
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	1	0.73
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	10	0.73
(1,727)	1:724:A:GLU:H	1:723:A:MET:H	17	0.73
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	19	0.73
(1,395)	1:669:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD21	10	0.73
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD21	16	0.73
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	6	0.72
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	7	0.72
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	7	0.72
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:711:A:GLN:HB2	19	0.72
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	8	0.72
(3,78)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HB2	17	0.72
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	9	0.72
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB1	3	0.72
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	9	0.72
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	10	0.72
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	17	0.72
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	2	0.72
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	4	0.72
(1,770)	1:655:A:GLU:H	1:654:A:GLY:HA3	7	0.72
(1,770)	1:655:A:GLU:H	1:654:A:GLY:HA3	8	0.72
(1,502)	1:659:A:MET:HE1	1:705:A:LYS:HE2	9	0.72
(1,243)	1:675:A:LEU:HD22	1:671:A:GLU:HG3	4	0.72
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	3	0.72
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD12	7	0.72
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD13	10	0.72
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD12	11	0.72
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	10	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:668:A:LEU:HB3	5	0.71
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	5	0.71
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	19	0.71
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:714:A:GLN:HB3	16	0.71
(3,122)	1:699:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HD2	11	0.71
(2,7)	1:651:A:ASP:H	1:649:A:ASP:HB3	4	0.71
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD23	16	0.71
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG23	7	0.71
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG21	9	0.71
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	12	0.71
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	14	0.71
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	16	0.71
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	4	0.71
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	12	0.71
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	16	0.71
(1,770)	1:655:A:GLU:H	1:654:A:GLY:HA3	20	0.71
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	20	0.71
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	5	0.71
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	9	0.71
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	15	0.71
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	17	0.71
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	19	0.71
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	3	0.7
(3,137)	1:722:A:GLN:HG2	1:725:A:GLU:HB2	5	0.7
(3,57)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG3	11	0.7
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	16	0.7
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	8	0.7
(1,803)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HB3	15	0.7
(1,704)	1:684:A:LYS:H	1:684:A:LYS:HG2	3	0.7
(1,416)	1:635:A:LEU:HD23	1:632:A:GLN:HB2	17	0.7
(1,376)	1:672:A:ALA:HB1	1:692:A:LEU:HD21	6	0.7
(1,286)	1:675:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HG2	9	0.7
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD12	2	0.7
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD13	12	0.7
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD12	13	0.7
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD12	14	0.7
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD13	16	0.7
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD13	18	0.7
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	18	0.69
(3,130)	1:634:A:TRP:HB2	1:636:A:GLU:HB2	9	0.69
(3,124)	1:635:A:LEU:HD23	1:638:A:LEU:HA	13	0.69
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	2	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	7	0.69
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	20	0.69
(1,770)	1:655:A:GLU:H	1:654:A:GLY:HA3	17	0.69
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	6	0.69
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	7	0.69
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	15	0.69
(1,524)	1:635:A:LEU:HD12	1:706:A:GLY:HA3	16	0.69
(1,489)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HG3	2	0.69
(1,414)	1:675:A:LEU:HD13	1:688:A:ARG:HG3	6	0.69
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD11	15	0.69
(1,355)	1:674:A:MET:HE2	1:671:A:GLU:HA	1	0.69
(1,242)	1:675:A:LEU:HD23	1:672:A:ALA:HA	18	0.69
(1,153)	1:708:A:LEU:HB2	1:708:A:LEU:HD11	8	0.69
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	12	0.68
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	14	0.68
(3,122)	1:699:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HD2	19	0.68
(3,68)	1:676:A:PHE:HZ	1:718:A:GLU:HB2	2	0.68
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	1	0.68
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	6	0.68
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	19	0.68
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	6	0.68
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	20	0.68
(1,798)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HA	17	0.68
(1,754)	1:685:A:ASP:H	1:675:A:LEU:HD11	4	0.68
(1,500)	1:667:A:MET:HE3	1:667:A:MET:HG2	2	0.68
(1,500)	1:667:A:MET:HE3	1:667:A:MET:HG2	7	0.68
(1,500)	1:667:A:MET:HE3	1:667:A:MET:HG2	9	0.68
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	11	0.68
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB3	17	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB2	1:708:A:LEU:HD12	2	0.68
(1,377)	1:700:A:ALA:HB2	1:708:A:LEU:HD11	17	0.68
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE3	15	0.68
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE3	17	0.68
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE3	2	0.67
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:704:A:MET:HE1	14	0.67
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB3	16	0.67
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:674:A:MET:HA	2	0.67
(1,1235)	1:723:A:MET:H	1:725:A:GLU:HB2	5	0.67
(1,979)	1:717:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	8	0.67
(1,667)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HG	15	0.67
(1,500)	1:667:A:MET:HE1	1:667:A:MET:HG2	13	0.67
(1,392)	1:692:A:LEU:HD21	1:691:A:ASP:HB2	20	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD11	19	0.67
(1,300)	1:677:A:THR:HG22	1:673:A:GLU:HG3	5	0.67
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	8	0.67
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	5	0.67
(1,116)	1:678:A:GLY:HA2	1:684:A:LYS:HD2	9	0.67
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	15	0.66
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	11	0.66
(3,105)	1:665:A:TYR:HB2	1:668:A:LEU:HD23	6	0.66
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:725:A:GLU:HA	10	0.66
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	13	0.66
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD21	10	0.66
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	20	0.66
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	17	0.66
(1,772)	1:655:A:GLU:H	1:655:A:GLU:HB2	1	0.66
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	13	0.66
(1,524)	1:635:A:LEU:HD13	1:706:A:GLY:HA3	14	0.66
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	18	0.66
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	20	0.66
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	13	0.66
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	5	0.65
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	17	0.65
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB1	12	0.65
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	13	0.65
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD12	14	0.65
(2,5)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:H	20	0.65
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	7	0.65
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG21	15	0.65
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	11	0.65
(1,772)	1:655:A:GLU:H	1:655:A:GLU:HB2	12	0.65
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	5	0.65
(1,500)	1:667:A:MET:HE1	1:667:A:MET:HG2	3	0.65
(1,500)	1:667:A:MET:HE3	1:667:A:MET:HG2	14	0.65
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB2	10	0.65
(1,493)	1:665:A:TYR:H	1:669:A:ALA:HB1	15	0.65
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	18	0.65
(1,490)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HD2	20	0.65
(1,489)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HG3	20	0.65
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	7	0.65
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	6	0.65
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD21	11	0.65
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	18	0.64
(3,289)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HB3	16	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	6	0.64
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	8	0.64
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG21	5	0.64
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG22	14	0.64
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	14	0.64
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	16	0.64
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	19	0.64
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	18	0.64
(1,528)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HA	5	0.64
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	2	0.64
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD22	1	0.64
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD22	2	0.64
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	12	0.64
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD21	17	0.64
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:668:A:LEU:HB3	6	0.63
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG21	6	0.63
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	15	0.63
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	20	0.63
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	10	0.63
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	7	0.63
(1,972)	1:717:A:GLU:H	1:715:A:LYS:HD2	11	0.63
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	6	0.63
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	6	0.63
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	2	0.63
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	9	0.63
(1,604)	1:634:A:TRP:HE1	1:635:A:LEU:HD13	6	0.63
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	8	0.63
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	8	0.63
(1,489)	1:674:A:MET:HE2	1:670:A:ARG:HG3	9	0.63
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	12	0.63
(1,353)	1:704:A:MET:HE1	1:704:A:MET:HA	13	0.63
(1,299)	1:694:A:THR:HG22	1:716:A:ALA:HB2	12	0.63
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	6	0.63
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	4	0.63
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD21	7	0.63
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD21	8	0.63
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD21	9	0.63
(1,28)	1:648:A:THR:HA	1:648:A:THR:HG23	11	0.63
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	11	0.62
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	7	0.62
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	9	0.62
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HB2	6	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,99)	1:663:A:PRO:HB3	1:708:A:LEU:HB3	4	0.62
(3,80)	1:708:A:LEU:HD12	1:665:A:TYR:HB3	14	0.62
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	17	0.62
(1,770)	1:655:A:GLU:H	1:654:A:GLY:HA3	10	0.62
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	5	0.62
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB3	4	0.62
(1,576)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HE2	14	0.62
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD11	3	0.62
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	9	0.62
(1,302)	1:665:A:TYR:HE2	1:703:A:ALA:HB1	11	0.62
(1,246)	1:692:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HB2	11	0.62
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD22	11	0.62
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD21	13	0.62
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD22	15	0.62
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE3	20	0.62
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	19	0.61
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD11	11	0.61
(3,164)	1:719:A:ALA:HB2	1:685:A:ASP:HB3	11	0.61
(3,124)	1:635:A:LEU:HD21	1:638:A:LEU:HA	6	0.61
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	6	0.61
(3,3)	1:693:A:TYR:HA	1:713:A:TYR:HA	9	0.61
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE2	10	0.61
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	4	0.61
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	3	0.61
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	13	0.61
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	18	0.61
(1,422)	1:635:A:LEU:HD12	1:636:A:GLU:HB2	19	0.61
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	18	0.61
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	2	0.61
(1,341)	1:697:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HA	20	0.61
(1,300)	1:677:A:THR:HG21	1:673:A:GLU:HG3	9	0.61
(1,277)	1:708:A:LEU:HD13	1:707:A:ARG:HG3	8	0.61
(1,243)	1:675:A:LEU:HD21	1:671:A:GLU:HG3	18	0.61
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	5	0.61
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	3	0.61
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	18	0.61
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD23	14	0.61
(1,14)	1:628:A:PRO:HA	1:631:A:CYS:HB2	1	0.61
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	13	0.6
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	2	0.6
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	15	0.6
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:714:A:GLN:HA	9	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,77)	1:635:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HA	16	0.6
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	19	0.6
(3,7)	1:631:A:CYS:HA	1:634:A:TRP:HB3	13	0.6
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	18	0.6
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	16	0.6
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	8	0.6
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB1	20	0.6
(1,508)	1:625:A:HIS:HB3	1:656:A:TYR:HD2	14	0.6
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB1	15	0.6
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	10	0.6
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	5	0.6
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	20	0.6
(3,281)	1:660:A:GLN:H	1:661:A:ASP:H	5	0.59
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:714:A:GLN:HA	6	0.59
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	8	0.59
(1,988)	1:648:A:THR:H	1:648:A:THR:HG23	3	0.59
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	1	0.59
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	9	0.59
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	15	0.59
(1,819)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:HA	18	0.59
(1,770)	1:655:A:GLU:H	1:654:A:GLY:HA3	1	0.59
(1,729)	1:724:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HB3	8	0.59
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB1	2	0.59
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	11	0.59
(1,354)	1:719:A:ALA:HB1	1:689:A:SER:HB3	5	0.59
(1,341)	1:697:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HA	14	0.59
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	19	0.59
(1,286)	1:675:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HG2	13	0.59
(1,286)	1:675:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HG2	17	0.59
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	6	0.59
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD23	14	0.59
(1,132)	1:645:A:LEU:HB2	1:645:A:LEU:HD22	19	0.59
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	6	0.59
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	1	0.58
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	11	0.58
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	12	0.58
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	14	0.58
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:701:A:MET:HE1	10	0.58
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	16	0.58
(3,131)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HB2	1	0.58
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:714:A:GLN:HA	2	0.58
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:714:A:GLN:HA	17	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	13	0.58
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:725:A:GLU:HA	7	0.58
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	11	0.58
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD12	20	0.58
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	20	0.58
(1,997)	1:643:A:THR:H	1:643:A:THR:HG23	14	0.58
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	7	0.58
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	12	0.58
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	3	0.58
(1,727)	1:724:A:GLU:H	1:723:A:MET:H	15	0.58
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	11	0.58
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	12	0.58
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB2	12	0.58
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB3	18	0.58
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	17	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	5	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	7	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HA	8	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HA	11	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	13	0.58
(1,341)	1:697:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HA	18	0.58
(3,131)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HB2	15	0.57
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:714:A:GLN:HA	13	0.57
(3,122)	1:699:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HD2	16	0.57
(3,57)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG2	6	0.57
(3,55)	1:683:A:GLU:HG2	1:684:A:LYS:HA	3	0.57
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD13	6	0.57
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD22	19	0.57
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	3	0.57
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	3	0.57
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	14	0.57
(1,617)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HB1	1	0.57
(1,528)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HA	13	0.57
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	19	0.57
(1,341)	1:697:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HA	1	0.57
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	10	0.57
(1,341)	1:697:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HA	12	0.57
(1,341)	1:697:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HA	15	0.57
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	10	0.57
(1,286)	1:675:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HG2	5	0.57
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	15	0.57
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:704:A:MET:HE3	17	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	1	0.56
(2,7)	1:651:A:ASP:H	1:649:A:ASP:HB3	10	0.56
(1,1190)	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:HE22	6	0.56
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	20	0.56
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	4	0.56
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	6	0.56
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	17	0.56
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	12	0.56
(1,605)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HA	12	0.56
(1,480)	1:628:A:PRO:HD2	1:627:A:SER:HA	4	0.56
(1,354)	1:719:A:ALA:HB3	1:689:A:SER:HB3	8	0.56
(1,341)	1:697:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HA	3	0.56
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	5	0.56
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	20	0.56
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD21	2	0.56
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	15	0.56
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	20	0.55
(3,281)	1:660:A:GLN:H	1:661:A:ASP:H	4	0.55
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	16	0.55
(3,169)	1:673:A:GLU:HA	1:715:A:LYS:HD3	17	0.55
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	18	0.55
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB1	4	0.55
(3,83)	1:638:A:LEU:HD23	1:634:A:TRP:HB2	7	0.55
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	15	0.55
(1,893)	1:659:A:MET:H	1:657:A:ASP:HA	12	0.55
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	6	0.55
(1,852)	1:636:A:GLU:H	1:635:A:LEU:HB2	9	0.55
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	6	0.55
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	19	0.55
(1,276)	1:708:A:LEU:HD11	1:666:A:MET:HG2	15	0.55
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD23	1	0.55
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	4	0.55
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	20	0.54
(3,270)	1:661:A:ASP:H	1:661:A:ASP:HB3	5	0.54
(3,170)	1:709:A:ALA:HB3	1:711:A:GLN:HB2	10	0.54
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	2	0.54
(3,99)	1:663:A:PRO:HB3	1:708:A:LEU:HB3	1	0.54
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	1	0.54
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	4	0.54
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	16	0.54
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	10	0.54
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	7	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	5	0.54
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	19	0.54
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	1	0.54
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	6	0.54
(1,360)	1:674:A:MET:HE2	1:682:A:LEU:HD22	19	0.54
(1,341)	1:697:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HA	6	0.54
(1,341)	1:697:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HA	17	0.54
(1,305)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HD2	11	0.54
(1,251)	1:668:A:LEU:HD22	1:664:A:ARG:HD2	7	0.54
(1,246)	1:692:A:LEU:HD12	1:671:A:GLU:HB2	3	0.54
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	9	0.54
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	10	0.53
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	16	0.53
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:701:A:MET:HE2	8	0.53
(3,104)	1:665:A:TYR:HA	1:663:A:PRO:HB3	16	0.53
(3,83)	1:638:A:LEU:HD22	1:634:A:TRP:HB2	11	0.53
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	2	0.53
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	12	0.53
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	17	0.53
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	19	0.53
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	17	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	1	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	2	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	3	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	7	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	9	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	11	0.53
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	19	0.53
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	14	0.53
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	17	0.53
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	18	0.53
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	3	0.53
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	7	0.53
(1,605)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HA	6	0.53
(1,522)	1:631:A:CYS:HB2	1:635:A:LEU:HD11	16	0.53
(1,514)	1:637:A:ALA:HB3	1:634:A:TRP:HZ3	8	0.53
(1,341)	1:697:A:ALA:HB2	1:698:A:GLU:HA	16	0.53
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB3	14	0.53
(1,296)	1:677:A:THR:HA	1:677:A:THR:HG23	1	0.53
(1,276)	1:708:A:LEU:HD13	1:666:A:MET:HG2	16	0.53
(1,246)	1:692:A:LEU:HD12	1:671:A:GLU:HB2	16	0.53
(1,116)	1:678:A:GLY:HA2	1:684:A:LYS:HD2	14	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	5	0.53
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	6	0.52
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	7	0.52
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB1	15	0.52
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	4	0.52
(3,78)	1:638:A:LEU:HD11	1:634:A:TRP:HB2	8	0.52
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	15	0.52
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	9	0.52
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	17	0.52
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	10	0.52
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	13	0.52
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE2	13	0.52
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	5	0.52
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	10	0.52
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	12	0.52
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	14	0.52
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	16	0.52
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	17	0.52
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	1	0.52
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	13	0.52
(1,468)	1:663:A:PRO:HD3	1:659:A:MET:HA	15	0.52
(1,311)	1:703:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HB3	18	0.52
(1,250)	1:692:A:LEU:HD13	1:672:A:ALA:HA	15	0.52
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD22	6	0.52
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	7	0.52
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	12	0.51
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	2	0.51
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	13	0.51
(3,93)	1:637:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD22	12	0.51
(3,61)	1:704:A:MET:HG3	1:659:A:MET:HB2	1	0.51
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD13	5	0.51
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	9	0.51
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	5	0.51
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	14	0.51
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	11	0.51
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	13	0.51
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	15	0.51
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	15	0.51
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	3	0.51
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	20	0.51
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	9	0.51
(1,506)	1:672:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HA	6	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,417)	1:635:A:LEU:HD23	1:636:A:GLU:HG2	19	0.51
(1,414)	1:675:A:LEU:HD12	1:688:A:ARG:HG3	13	0.51
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD12	14	0.51
(1,296)	1:677:A:THR:HA	1:677:A:THR:HG21	18	0.51
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD23	18	0.51
(1,277)	1:708:A:LEU:HD13	1:707:A:ARG:HG3	15	0.51
(1,1)	1:659:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	13	0.51
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	7	0.5
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	13	0.5
(3,228)	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:HG23	1	0.5
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:689:A:SER:HB2	7	0.5
(3,122)	1:699:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HD2	1	0.5
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	17	0.5
(1,1229)	1:654:A:GLY:H	1:651:A:ASP:HA	1	0.5
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	11	0.5
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	1	0.5
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	20	0.5
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	4	0.5
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	18	0.5
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	3	0.5
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	8	0.5
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	20	0.5
(1,698)	1:637:A:ALA:H	1:636:A:GLU:HB2	6	0.5
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	14	0.5
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	11	0.5
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	17	0.5
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	7	0.5
(1,376)	1:672:A:ALA:HB3	1:692:A:LEU:HD21	10	0.5
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD21	15	0.5
(1,296)	1:677:A:THR:HA	1:677:A:THR:HG23	10	0.5
(1,246)	1:692:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HB2	2	0.5
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD23	7	0.5
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD21	19	0.5
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	17	0.5
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	19	0.49
(3,306)	1:659:A:MET:H	1:704:A:MET:HB2	13	0.49
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	4	0.49
(3,283)	1:668:A:LEU:H	1:668:A:LEU:HG	18	0.49
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	8	0.49
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD11	10	0.49
(3,122)	1:699:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HD2	17	0.49
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	3	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	20	0.49
(1,1086)	1:629:A:ASP:H	1:628:A:PRO:HD2	19	0.49
(1,928)	1:627:A:SER:H	1:626:A:MET:HA	10	0.49
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	5	0.49
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	14	0.49
(1,837)	1:646:A:GLU:H	1:645:A:LEU:H	9	0.49
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	2	0.49
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	13	0.49
(1,746)	1:656:A:TYR:H	1:655:A:GLU:HA	15	0.49
(1,742)	1:708:A:LEU:H	1:708:A:LEU:HB3	8	0.49
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	4	0.49
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	13	0.49
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	8	0.49
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	13	0.49
(1,698)	1:637:A:ALA:H	1:636:A:GLU:HB2	9	0.49
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	4	0.49
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	13	0.49
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	11	0.49
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	10	0.49
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	15	0.49
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD23	9	0.49
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	8	0.49
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	17	0.48
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	13	0.48
(3,68)	1:676:A:PHE:HZ	1:718:A:GLU:HB2	4	0.48
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	6	0.48
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	12	0.48
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	4	0.48
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	20	0.48
(1,354)	1:719:A:ALA:HB3	1:689:A:SER:HB3	4	0.48
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE1	10	0.48
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	8	0.48
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	14	0.48
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	7	0.48
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	9	0.48
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	15	0.48
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	16	0.48
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	18	0.48
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	19	0.48
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG22	3	0.48
(3,122)	1:699:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HD2	5	0.47
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	8	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	6	0.47
(3,13)	1:695:A:GLN:HA	1:692:A:LEU:HD13	10	0.47
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	10	0.47
(1,1043)	1:665:A:TYR:H	1:666:A:MET:HB3	9	0.47
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE3	2	0.47
(1,777)	1:633:A:ASP:H	1:633:A:ASP:HB2	17	0.47
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	1	0.47
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	2	0.47
(1,667)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HG	5	0.47
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	5	0.47
(1,645)	1:683:A:GLU:H	1:683:A:GLU:HB3	19	0.47
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	10	0.47
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB1	19	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE3	1:668:A:LEU:HD13	8	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD11	12	0.47
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD12	18	0.47
(1,341)	1:697:A:ALA:HB3	1:698:A:GLU:HA	4	0.47
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	11	0.47
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	7	0.47
(1,289)	1:671:A:GLU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	7	0.47
(1,276)	1:708:A:LEU:HD11	1:666:A:MET:HG2	17	0.47
(1,222)	1:636:A:GLU:HB2	1:636:A:GLU:HG2	8	0.47
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	12	0.47
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	2	0.47
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG22	6	0.47
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	10	0.47
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	12	0.46
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	8	0.46
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	20	0.46
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB2	11	0.46
(3,147)	1:636:A:GLU:HB2	1:706:A:GLY:HA2	17	0.46
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	5	0.46
(1,1229)	1:654:A:GLY:H	1:651:A:ASP:HA	20	0.46
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	2	0.46
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	17	0.46
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	7	0.46
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	12	0.46
(1,523)	1:635:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HZ3	2	0.46
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	14	0.46
(1,452)	1:645:A:LEU:HB2	1:647:A:MET:HA	20	0.46
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD13	16	0.46
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	6	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,300)	1:677:A:THR:HG21	1:673:A:GLU:HG3	4	0.46
(1,299)	1:694:A:THR:HG21	1:716:A:ALA:HB3	15	0.46
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	3	0.45
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	7	0.45
(3,326)	1:643:A:THR:H	1:642:A:ASN:H	13	0.45
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	1	0.45
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	2	0.45
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:704:A:MET:HE3	4	0.45
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	10	0.45
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB2	8	0.45
(3,77)	1:635:A:LEU:HD12	1:634:A:TRP:HA	13	0.45
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	3	0.45
(3,63)	1:701:A:MET:HG2	1:701:A:MET:HB2	8	0.45
(2,7)	1:651:A:ASP:H	1:649:A:ASP:HB3	11	0.45
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	7	0.45
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	2	0.45
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	7	0.45
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	15	0.45
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	16	0.45
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	18	0.45
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	9	0.45
(1,729)	1:724:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HB3	11	0.45
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	7	0.45
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE2	20	0.45
(1,421)	1:708:A:LEU:HD12	1:711:A:GLN:HB2	16	0.45
(1,377)	1:700:A:ALA:HB3	1:708:A:LEU:HD13	6	0.45
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD13	5	0.45
(1,360)	1:674:A:MET:HE2	1:682:A:LEU:HD21	11	0.45
(1,354)	1:719:A:ALA:HB3	1:689:A:SER:HB3	13	0.45
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE1	5	0.45
(1,305)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HD2	10	0.45
(1,238)	1:670:A:ARG:HG3	1:670:A:ARG:HB2	1	0.45
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	13	0.44
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	20	0.44
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB1	5	0.44
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	12	0.44
(3,122)	1:699:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HD2	9	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	1	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	2	0.44
(3,63)	1:701:A:MET:HG2	1:701:A:MET:HB2	4	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	5	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	6	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	7	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	9	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	10	0.44
(3,63)	1:701:A:MET:HG2	1:701:A:MET:HB2	11	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	12	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	13	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	14	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	15	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	16	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	17	0.44
(3,63)	1:701:A:MET:HG2	1:701:A:MET:HB2	18	0.44
(3,63)	1:674:A:MET:HB2	1:674:A:MET:HG2	19	0.44
(3,63)	1:701:A:MET:HG2	1:701:A:MET:HB2	20	0.44
(1,1169)	1:655:A:GLU:H	1:626:A:MET:HB3	4	0.44
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	8	0.44
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	6	0.44
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	12	0.44
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	17	0.44
(1,826)	1:668:A:LEU:H	1:667:A:MET:HB2	9	0.44
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	7	0.44
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	4	0.44
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	3	0.44
(1,620)	1:644:A:ALA:H	1:643:A:THR:H	11	0.44
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	10	0.44
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	3	0.44
(1,506)	1:672:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HA	9	0.44
(1,502)	1:659:A:MET:HE2	1:705:A:LYS:HE2	7	0.44
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	16	0.44
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD13	11	0.44
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD23	16	0.44
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	11	0.44
(1,335)	1:697:A:ALA:HB1	1:713:A:TYR:HE2	11	0.44
(1,300)	1:677:A:THR:HG21	1:673:A:GLU:HG3	20	0.44
(1,284)	1:635:A:LEU:HD22	1:635:A:LEU:HB2	17	0.44
(1,267)	1:715:A:LYS:HG2	1:712:A:TYR:HB2	17	0.44
(1,246)	1:692:A:LEU:HD12	1:671:A:GLU:HB2	13	0.44
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD23	5	0.44
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	2	0.44
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	5	0.44
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	9	0.44
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG22	11	0.44
(1,22)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG21	19	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	2	0.43
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	15	0.43
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	11	0.43
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	7	0.43
(3,27)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HG2	7	0.43
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	16	0.43
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	14	0.43
(1,969)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HB3	16	0.43
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	10	0.43
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	1	0.43
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	3	0.43
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	8	0.43
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	9	0.43
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	19	0.43
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	9	0.43
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	18	0.43
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	11	0.43
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	16	0.43
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	3	0.43
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	8	0.43
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	11	0.43
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	19	0.43
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	12	0.43
(1,335)	1:697:A:ALA:HB2	1:713:A:TYR:HE2	14	0.43
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	8	0.43
(1,246)	1:692:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HB2	9	0.43
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	6	0.43
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	19	0.43
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	9	0.42
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	11	0.42
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB1	4	0.42
(3,161)	1:632:A:GLN:HG2	1:635:A:LEU:HD11	9	0.42
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	13	0.42
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	5	0.42
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	13	0.42
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	4	0.42
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	5	0.42
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	13	0.42
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	20	0.42
(1,772)	1:655:A:GLU:H	1:655:A:GLU:HB2	3	0.42
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	4	0.42
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,698)	1:637:A:ALA:H	1:636:A:GLU:HB2	2	0.42
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	1	0.42
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	4	0.42
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	9	0.42
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	13	0.42
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	14	0.42
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	16	0.42
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	17	0.42
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	10	0.42
(1,490)	1:674:A:MET:HE3	1:670:A:ARG:HD2	3	0.42
(1,392)	1:692:A:LEU:HD22	1:691:A:ASP:HB2	14	0.42
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	17	0.42
(1,362)	1:667:A:MET:HE2	1:668:A:LEU:HD13	4	0.42
(1,284)	1:635:A:LEU:HD23	1:635:A:LEU:HB2	15	0.42
(1,247)	1:692:A:LEU:HD11	1:672:A:ALA:HB1	7	0.42
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD21	17	0.42
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	11	0.42
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	19	0.42
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	10	0.41
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:668:A:LEU:HB3	10	0.41
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	3	0.41
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	15	0.41
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	5	0.41
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	9	0.41
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	4	0.41
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	17	0.41
(1,1045)	1:665:A:TYR:H	1:663:A:PRO:HB3	8	0.41
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD21	9	0.41
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	1	0.41
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	18	0.41
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	4	0.41
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	11	0.41
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	14	0.41
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	14	0.41
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	11	0.41
(1,667)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HG	6	0.41
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	12	0.41
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	18	0.41
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	20	0.41
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	16	0.41
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	5	0.41
(1,506)	1:672:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HA	19	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,392)	1:692:A:LEU:HD21	1:691:A:ASP:HB2	7	0.41
(1,367)	1:720:A:TRP:HA	1:723:A:MET:HE3	15	0.41
(1,351)	1:659:A:MET:HE3	1:662:A:GLU:HA	19	0.41
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB1	18	0.41
(1,277)	1:708:A:LEU:HD12	1:707:A:ARG:HG3	18	0.41
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	6	0.41
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	4	0.4
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	17	0.4
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	1	0.4
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	19	0.4
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:689:A:SER:HB2	8	0.4
(3,125)	1:684:A:LYS:HG3	1:689:A:SER:HB2	12	0.4
(3,124)	1:635:A:LEU:HD22	1:638:A:LEU:HA	7	0.4
(3,94)	1:716:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	10	0.4
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	19	0.4
(1,1203)	1:642:A:ASN:H	1:640:A:TRP:HA	18	0.4
(1,868)	1:688:A:ARG:H	1:687:A:GLN:HB2	2	0.4
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	9	0.4
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	16	0.4
(1,698)	1:637:A:ALA:H	1:636:A:GLU:HB2	19	0.4
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	2	0.4
(1,605)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HA	7	0.4
(1,605)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HA	18	0.4
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	5	0.4
(1,422)	1:635:A:LEU:HD12	1:636:A:GLU:HB2	8	0.4
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD13	12	0.4
(1,362)	1:667:A:MET:HE1	1:668:A:LEU:HD11	1	0.4
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	7	0.4
(1,246)	1:692:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HB2	1	0.4
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD23	8	0.4
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	17	0.4
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	13	0.39
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	17	0.39
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB2	10	0.39
(3,83)	1:638:A:LEU:HD22	1:634:A:TRP:HB2	16	0.39
(3,79)	1:645:A:LEU:HD13	1:645:A:LEU:HG	14	0.39
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	19	0.39
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	12	0.39
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD12	3	0.39
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	3	0.39
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	8	0.39
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD21	7	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,969)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HB3	1	0.39
(1,969)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HB3	2	0.39
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	15	0.39
(1,865)	1:666:A:MET:H	1:666:A:MET:HB3	10	0.39
(1,772)	1:655:A:GLU:H	1:655:A:GLU:HB2	14	0.39
(1,754)	1:685:A:ASP:H	1:675:A:LEU:HD13	18	0.39
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	19	0.39
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	10	0.39
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	10	0.39
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	11	0.39
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD11	16	0.39
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB1	13	0.39
(1,452)	1:645:A:LEU:HB2	1:647:A:MET:HA	9	0.39
(1,414)	1:675:A:LEU:HD11	1:688:A:ARG:HG3	4	0.39
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	14	0.39
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	14	0.38
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	1	0.38
(3,178)	1:641:A:TYR:HD2	1:714:A:GLN:HB3	2	0.38
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	3	0.38
(3,79)	1:682:A:LEU:HD11	1:682:A:LEU:HG	2	0.38
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	6	0.38
(3,79)	1:645:A:LEU:HD12	1:645:A:LEU:HG	10	0.38
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	15	0.38
(3,79)	1:682:A:LEU:HD12	1:682:A:LEU:HG	18	0.38
(3,55)	1:724:A:GLU:HG2	1:725:A:GLU:HA	4	0.38
(3,28)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HB2	15	0.38
(1,1012)	1:704:A:MET:H	1:704:A:MET:HG2	4	0.38
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	17	0.38
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	8	0.38
(1,933)	1:629:A:ASP:H	1:628:A:PRO:HA	17	0.38
(1,892)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:H	8	0.38
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	2	0.38
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	10	0.38
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	10	0.38
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	16	0.38
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	19	0.38
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	3	0.38
(1,528)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HA	12	0.38
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	17	0.38
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	2	0.38
(1,506)	1:672:A:ALA:HB1	1:712:A:TYR:HA	13	0.38
(1,503)	1:666:A:MET:HE3	1:705:A:LYS:HE2	6	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	10	0.38
(1,365)	1:700:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HE2	14	0.38
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	17	0.38
(1,299)	1:694:A:THR:HG21	1:716:A:ALA:HB2	6	0.38
(1,276)	1:708:A:LEU:HD11	1:666:A:MET:HG2	12	0.38
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	6	0.37
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	7	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD11	1:682:A:LEU:HG	1	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	3	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD11	1:682:A:LEU:HG	4	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	5	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD12	1:682:A:LEU:HG	7	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	9	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	11	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD12	1:682:A:LEU:HG	12	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD12	1:682:A:LEU:HG	16	0.37
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	20	0.37
(3,44)	1:664:A:ARG:HD2	1:668:A:LEU:HD12	20	0.37
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	11	0.37
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	13	0.37
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	19	0.37
(1,852)	1:636:A:GLU:H	1:635:A:LEU:HB2	2	0.37
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	9	0.37
(1,746)	1:656:A:TYR:H	1:655:A:GLU:HA	6	0.37
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	2	0.37
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	8	0.37
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	8	0.37
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	18	0.37
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	2	0.37
(1,528)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HA	10	0.37
(1,506)	1:672:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HA	3	0.37
(1,443)	1:702:A:GLU:HB2	1:699:A:ALA:HA	8	0.37
(1,421)	1:708:A:LEU:HD13	1:711:A:GLN:HB2	3	0.37
(1,416)	1:635:A:LEU:HD21	1:632:A:GLN:HB2	20	0.37
(1,354)	1:719:A:ALA:HB2	1:689:A:SER:HB3	7	0.37
(1,276)	1:708:A:LEU:HD11	1:666:A:MET:HG2	19	0.37
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD22	2	0.37
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	19	0.37
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	19	0.36
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	5	0.36
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	6	0.36
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	18	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,166)	1:631:A:CYS:HB2	1:704:A:MET:HA	7	0.36
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	8	0.36
(3,79)	1:682:A:LEU:HD12	1:682:A:LEU:HG	17	0.36
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	5	0.36
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	6	0.36
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	20	0.36
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	17	0.36
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	3	0.36
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	17	0.36
(1,709)	1:699:A:ALA:H	1:698:A:GLU:HB2	10	0.36
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	20	0.36
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	9	0.36
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	10	0.36
(1,553)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HB3	20	0.36
(1,514)	1:637:A:ALA:HB1	1:634:A:TRP:HZ3	15	0.36
(1,422)	1:635:A:LEU:HD12	1:636:A:GLU:HB2	10	0.36
(1,362)	1:667:A:MET:HE1	1:668:A:LEU:HD13	20	0.36
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD22	7	0.36
(1,315)	1:634:A:TRP:HA	1:637:A:ALA:HB1	6	0.36
(1,311)	1:703:A:ALA:HB3	1:665:A:TYR:HB3	9	0.36
(1,305)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HD2	14	0.36
(1,299)	1:694:A:THR:HG21	1:716:A:ALA:HB3	9	0.36
(1,299)	1:694:A:THR:HG21	1:716:A:ALA:HB2	17	0.36
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	3	0.36
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	15	0.36
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	16	0.36
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	9	0.35
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB2	19	0.35
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB2	14	0.35
(3,131)	1:638:A:LEU:HD13	1:634:A:TRP:HB2	17	0.35
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	16	0.35
(3,95)	1:719:A:ALA:HB2	1:720:A:TRP:HD1	15	0.35
(3,88)	1:703:A:ALA:HB3	1:704:A:MET:HB2	4	0.35
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	5	0.35
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	19	0.35
(1,955)	1:639:A:HIS:H	1:639:A:HIS:HB3	8	0.35
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	8	0.35
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	5	0.35
(1,829)	1:668:A:LEU:H	1:668:A:LEU:HD11	6	0.35
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	5	0.35
(1,667)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HG	10	0.35
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	12	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	20	0.35
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	1	0.35
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	14	0.35
(1,489)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HG3	18	0.35
(1,353)	1:704:A:MET:HE2	1:704:A:MET:HA	17	0.35
(1,335)	1:697:A:ALA:HB2	1:713:A:TYR:HE2	8	0.35
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	17	0.35
(1,286)	1:675:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HG2	19	0.35
(1,284)	1:635:A:LEU:HD21	1:635:A:LEU:HB2	9	0.35
(1,246)	1:692:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HB2	17	0.35
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	1	0.35
(1,88)	1:672:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD21	18	0.35
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	9	0.34
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	17	0.34
(3,296)	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	8	0.34
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	19	0.34
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD12	18	0.34
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB2	13	0.34
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	2	0.34
(3,170)	1:709:A:ALA:HB1	1:698:A:GLU:HB2	4	0.34
(3,127)	1:715:A:LYS:HG2	1:673:A:GLU:HB3	11	0.34
(3,98)	1:669:A:ALA:HB1	1:672:A:ALA:HB1	17	0.34
(3,79)	1:682:A:LEU:HD13	1:682:A:LEU:HG	13	0.34
(3,28)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HB2	6	0.34
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	16	0.34
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD23	11	0.34
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	4	0.34
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	19	0.34
(1,428)	1:635:A:LEU:HD11	1:635:A:LEU:HA	8	0.34
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	15	0.34
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD23	9	0.34
(1,311)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HB3	11	0.34
(1,284)	1:635:A:LEU:HD23	1:635:A:LEU:HB2	8	0.34
(1,284)	1:635:A:LEU:HD22	1:635:A:LEU:HB2	10	0.34
(1,277)	1:708:A:LEU:HD13	1:707:A:ARG:HG3	5	0.34
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	10	0.34
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD21	12	0.34
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	12	0.34
(1,81)	1:659:A:MET:HA	1:659:A:MET:HG3	2	0.34
(1,81)	1:659:A:MET:HA	1:659:A:MET:HG3	5	0.34
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	10	0.34
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG2	4	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	5	0.33
(3,98)	1:669:A:ALA:HB2	1:672:A:ALA:HB2	4	0.33
(1,1126)	1:712:A:TYR:H	1:711:A:GLN:HB2	14	0.33
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	15	0.33
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	2	0.33
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	6	0.33
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	15	0.33
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	5	0.33
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	6	0.33
(1,480)	1:628:A:PRO:HD2	1:627:A:SER:HA	2	0.33
(1,428)	1:635:A:LEU:HD11	1:635:A:LEU:HA	10	0.33
(1,392)	1:692:A:LEU:HD21	1:691:A:ASP:HB2	13	0.33
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	19	0.33
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	20	0.33
(1,362)	1:667:A:MET:HE3	1:668:A:LEU:HD13	15	0.33
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD23	2	0.33
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	20	0.33
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE1	5	0.33
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG2	16	0.32
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	6	0.32
(3,94)	1:716:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	18	0.32
(3,83)	1:638:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HB2	6	0.32
(3,41)	1:707:A:ARG:HD2	1:707:A:ARG:HB2	2	0.32
(1,1190)	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:HE22	20	0.32
(1,1045)	1:665:A:TYR:H	1:663:A:PRO:HB3	18	0.32
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD21	13	0.32
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	7	0.32
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	8	0.32
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	8	0.32
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	1	0.32
(1,421)	1:708:A:LEU:HD13	1:711:A:GLN:HB2	17	0.32
(1,283)	1:682:A:LEU:HD22	1:674:A:MET:HB2	8	0.32
(1,211)	1:688:A:ARG:HB2	1:691:A:ASP:HB2	12	0.32
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD21	16	0.32
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	11	0.31
(3,295)	1:703:A:ALA:H	1:704:A:MET:HE2	9	0.31
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	10	0.31
(3,256)	1:708:A:LEU:H	1:705:A:LYS:HB2	1	0.31
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	7	0.31
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	17	0.31
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	18	0.31
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	9	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB2	8	0.31
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:689:A:SER:HB2	5	0.31
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	5	0.31
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD22	14	0.31
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD21	15	0.31
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD23	16	0.31
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD21	19	0.31
(3,27)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HG2	18	0.31
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD21	5	0.31
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	19	0.31
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	14	0.31
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	2	0.31
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	16	0.31
(1,515)	1:637:A:ALA:HB3	1:636:A:GLU:HB2	14	0.31
(1,508)	1:625:A:HIS:HB3	1:656:A:TYR:HD2	12	0.31
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	5	0.31
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD21	5	0.31
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD21	11	0.31
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	12	0.31
(1,246)	1:692:A:LEU:HD12	1:671:A:GLU:HB2	14	0.31
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	4	0.3
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	10	0.3
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG2	12	0.3
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	14	0.3
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	20	0.3
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD11	2	0.3
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	13	0.3
(3,137)	1:722:A:GLN:HG2	1:725:A:GLU:HB2	1	0.3
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB2	15	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD21	1	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD22	3	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD22	4	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD22	5	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD23	7	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD23	8	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD23	9	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD23	10	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD23	11	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD22	12	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD22	17	0.3
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD22	18	0.3
(3,82)	1:682:A:LEU:HG	1:682:A:LEU:HD22	20	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,41)	1:670:A:ARG:HD2	1:670:A:ARG:HB2	7	0.3
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	15	0.3
(2,1)	1:656:A:TYR:HA	1:625:A:HIS:HB3	4	0.3
(1,1190)	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:HE22	7	0.3
(1,1012)	1:704:A:MET:H	1:704:A:MET:HG2	7	0.3
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	14	0.3
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	10	0.3
(1,933)	1:629:A:ASP:H	1:628:A:PRO:HA	10	0.3
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	1	0.3
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	4	0.3
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	7	0.3
(1,527)	1:637:A:ALA:HB2	1:633:A:ASP:HB2	15	0.3
(1,430)	1:708:A:LEU:HG	1:705:A:LYS:HB2	4	0.3
(1,377)	1:700:A:ALA:HB1	1:708:A:LEU:HD13	18	0.3
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	2	0.3
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD23	12	0.3
(1,275)	1:708:A:LEU:HA	1:708:A:LEU:HD11	6	0.3
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	3	0.3
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	12	0.3
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD22	12	0.3
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD23	13	0.3
(1,147)	1:684:A:LYS:HE2	1:677:A:THR:HA	19	0.3
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	4	0.3
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	20	0.3
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB3	11	0.29
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD21	15	0.29
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD21	2	0.29
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD22	6	0.29
(3,82)	1:645:A:LEU:HG	1:645:A:LEU:HD23	13	0.29
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	2	0.29
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	19	0.29
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD13	14	0.29
(1,1231)	1:656:A:TYR:H	1:626:A:MET:HB3	3	0.29
(1,1128)	1:722:A:GLN:H	1:644:A:ALA:HB2	19	0.29
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	16	0.29
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	9	0.29
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	11	0.29
(1,772)	1:655:A:GLU:H	1:655:A:GLU:HB2	6	0.29
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	9	0.29
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	13	0.29
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	18	0.29
(1,666)	1:692:A:LEU:H	1:692:A:LEU:HB3	5	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	8	0.29
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	9	0.29
(1,528)	1:637:A:ALA:HB3	1:635:A:LEU:HA	20	0.29
(1,392)	1:692:A:LEU:HD23	1:691:A:ASP:HB2	8	0.29
(1,360)	1:674:A:MET:HE2	1:682:A:LEU:HD21	13	0.29
(1,301)	1:643:A:THR:HG22	1:646:A:GLU:HG2	1	0.29
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD23	20	0.29
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	18	0.29
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD21	20	0.29
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	12	0.29
(1,88)	1:672:A:ALA:HA	1:692:A:LEU:HD22	4	0.29
(3,372)	1:636:A:GLU:H	1:634:A:TRP:H	18	0.28
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG2	1	0.28
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	8	0.28
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	13	0.28
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB3	16	0.28
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	11	0.28
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	15	0.28
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB3	3	0.28
(3,77)	1:635:A:LEU:HD11	1:634:A:TRP:HA	19	0.28
(3,68)	1:676:A:PHE:HZ	1:718:A:GLU:HB2	5	0.28
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD21	8	0.28
(1,972)	1:717:A:GLU:H	1:715:A:LYS:HD2	16	0.28
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	8	0.28
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	1	0.28
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	3	0.28
(1,729)	1:724:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HB3	17	0.28
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	5	0.28
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	19	0.28
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	7	0.28
(1,506)	1:672:A:ALA:HB3	1:712:A:TYR:HA	7	0.28
(1,452)	1:645:A:LEU:HB2	1:647:A:MET:HA	19	0.28
(1,354)	1:719:A:ALA:HB2	1:689:A:SER:HB3	15	0.28
(1,349)	1:665:A:TYR:HE2	1:659:A:MET:HE2	13	0.28
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	3	0.28
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB1	9	0.28
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	20	0.28
(1,311)	1:703:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HB3	13	0.28
(1,251)	1:668:A:LEU:HD23	1:664:A:ARG:HD2	2	0.28
(1,251)	1:668:A:LEU:HD22	1:664:A:ARG:HD2	15	0.28
(1,246)	1:692:A:LEU:HD12	1:671:A:GLU:HB2	19	0.28
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	13	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	4	0.28
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	12	0.28
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	15	0.28
(3,326)	1:643:A:THR:H	1:642:A:ASN:H	11	0.27
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	11	0.27
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG3	2	0.27
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB2	2	0.27
(3,127)	1:715:A:LYS:HG2	1:673:A:GLU:HB3	18	0.27
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	12	0.27
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	4	0.27
(3,94)	1:716:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	15	0.27
(3,75)	1:628:A:PRO:HG2	1:657:A:ASP:HB2	14	0.27
(1,1046)	1:658:A:GLY:H	1:657:A:ASP:HA	7	0.27
(1,1005)	1:689:A:SER:H	1:684:A:LYS:HA	14	0.27
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	11	0.27
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	12	0.27
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	14	0.27
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	17	0.27
(1,800)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HB2	15	0.27
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	9	0.27
(1,421)	1:708:A:LEU:HD13	1:711:A:GLN:HB2	5	0.27
(1,360)	1:674:A:MET:HE2	1:682:A:LEU:HD22	3	0.27
(1,354)	1:719:A:ALA:HB3	1:689:A:SER:HB3	9	0.27
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE3	12	0.27
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB1	5	0.27
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	19	0.27
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB3	11	0.27
(1,277)	1:708:A:LEU:HD13	1:707:A:ARG:HG3	17	0.27
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD22	9	0.27
(1,260)	1:682:A:LEU:HD12	1:674:A:MET:HE1	17	0.27
(1,215)	1:670:A:ARG:HD2	1:670:A:ARG:HB2	3	0.27
(1,211)	1:688:A:ARG:HB2	1:691:A:ASP:HB2	10	0.27
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	3	0.27
(3,289)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HG	19	0.26
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG2	3	0.26
(3,248)	1:673:A:GLU:H	1:673:A:GLU:HG2	11	0.26
(3,177)	1:680:A:TYR:HD2	1:674:A:MET:HA	15	0.26
(3,127)	1:715:A:LYS:HG2	1:673:A:GLU:HB3	19	0.26
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	9	0.26
(3,92)	1:637:A:ALA:HB3	1:648:A:THR:HG23	19	0.26
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	10	0.26
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	19	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,41)	1:707:A:ARG:HD2	1:707:A:ARG:HB2	15	0.26
(1,1046)	1:658:A:GLY:H	1:657:A:ASP:HA	6	0.26
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	5	0.26
(1,892)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:H	10	0.26
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	14	0.26
(1,829)	1:668:A:LEU:H	1:668:A:LEU:HD11	17	0.26
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	10	0.26
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	13	0.26
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	14	0.26
(1,746)	1:656:A:TYR:H	1:655:A:GLU:HA	3	0.26
(1,746)	1:656:A:TYR:H	1:655:A:GLU:HA	18	0.26
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	9	0.26
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	19	0.26
(1,392)	1:692:A:LEU:HD22	1:691:A:ASP:HB2	9	0.26
(1,392)	1:692:A:LEU:HD22	1:691:A:ASP:HB2	11	0.26
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	3	0.26
(1,347)	1:665:A:TYR:H	1:659:A:MET:HE2	16	0.26
(1,335)	1:697:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	19	0.26
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB1	3	0.26
(1,299)	1:694:A:THR:HG22	1:716:A:ALA:HB2	4	0.26
(1,276)	1:708:A:LEU:HD11	1:666:A:MET:HG2	5	0.26
(1,246)	1:692:A:LEU:HD13	1:671:A:GLU:HB2	4	0.26
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD21	14	0.26
(1,211)	1:688:A:ARG:HB2	1:691:A:ASP:HB2	15	0.26
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	3	0.26
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	1	0.25
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:715:A:LYS:HB2	20	0.25
(3,122)	1:699:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HD2	2	0.25
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	8	0.25
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	17	0.25
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD22	1	0.25
(3,27)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG3	20	0.25
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	7	0.25
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	19	0.25
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	5	0.25
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	16	0.25
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	5	0.25
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	13	0.25
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	14	0.25
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	12	0.25
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	15	0.25
(1,528)	1:637:A:ALA:HB3	1:635:A:LEU:HA	4	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,282)	1:675:A:LEU:HD13	1:685:A:ASP:HB3	2	0.25
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD21	3	0.25
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD22	15	0.25
(1,215)	1:670:A:ARG:HD2	1:670:A:ARG:HB2	1	0.25
(1,215)	1:670:A:ARG:HD2	1:670:A:ARG:HB2	5	0.25
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD22	20	0.25
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD11	15	0.25
(1,1)	1:659:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	9	0.25
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB3	17	0.24
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB3	19	0.24
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB3	9	0.24
(3,98)	1:669:A:ALA:HB2	1:672:A:ALA:HB1	20	0.24
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	3	0.24
(1,987)	1:648:A:THR:H	1:647:A:MET:HE1	3	0.24
(1,939)	1:723:A:MET:H	1:723:A:MET:HG2	15	0.24
(1,904)	1:709:A:ALA:H	1:708:A:LEU:HB3	20	0.24
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	17	0.24
(1,748)	1:656:A:TYR:H	1:656:A:TYR:HB3	11	0.24
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB2	5	0.24
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	2	0.24
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	15	0.24
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	17	0.24
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	18	0.24
(1,551)	1:641:A:TYR:HE2	1:638:A:LEU:HD12	18	0.24
(1,506)	1:672:A:ALA:HB2	1:712:A:TYR:HA	16	0.24
(1,422)	1:635:A:LEU:HD11	1:636:A:GLU:HB2	17	0.24
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	7	0.24
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB1	4	0.24
(1,302)	1:665:A:TYR:HE2	1:703:A:ALA:HB1	14	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG21	1:716:A:ALA:HB2	19	0.24
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB3	20	0.24
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD23	11	0.24
(1,272)	1:665:A:TYR:HE2	1:708:A:LEU:HD11	19	0.24
(1,215)	1:670:A:ARG:HD2	1:670:A:ARG:HB2	4	0.24
(1,151)	1:708:A:LEU:HB3	1:705:A:LYS:HB2	16	0.24
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	3	0.24
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	12	0.23
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	20	0.23
(3,182)	1:712:A:TYR:HD2	1:716:A:ALA:HB3	18	0.23
(3,94)	1:716:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	1	0.23
(3,93)	1:637:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD13	9	0.23
(3,57)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG2	14	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	20	0.23
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD23	15	0.23
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD23	12	0.23
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	4	0.23
(1,800)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HB2	6	0.23
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	9	0.23
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	16	0.23
(1,727)	1:724:A:GLU:H	1:723:A:MET:H	3	0.23
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	17	0.23
(1,715)	1:672:A:ALA:H	1:692:A:LEU:HD12	7	0.23
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	3	0.23
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	6	0.23
(1,605)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HA	20	0.23
(1,534)	1:641:A:TYR:HD2	1:643:A:THR:HG21	8	0.23
(1,428)	1:635:A:LEU:HD11	1:635:A:LEU:HA	15	0.23
(1,392)	1:692:A:LEU:HD22	1:691:A:ASP:HB2	3	0.23
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	10	0.23
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD22	18	0.23
(1,335)	1:697:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	5	0.23
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	16	0.23
(1,314)	1:634:A:TRP:HE3	1:637:A:ALA:HB1	19	0.23
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	6	0.23
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD22	4	0.23
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	20	0.23
(1,244)	1:688:A:ARG:HB2	1:675:A:LEU:HD23	3	0.23
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	1	0.23
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	17	0.23
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	14	0.23
(1,47)	1:641:A:TYR:HA	1:638:A:LEU:HD12	18	0.23
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	3	0.22
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	7	0.22
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	9	0.22
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	10	0.22
(3,281)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	3	0.22
(3,256)	1:708:A:LEU:H	1:705:A:LYS:HB2	10	0.22
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	4	0.22
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD11	16	0.22
(3,173)	1:650:A:CYS:HB2	1:648:A:THR:HG22	1	0.22
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB1	4	0.22
(3,95)	1:719:A:ALA:HB2	1:720:A:TRP:HD1	20	0.22
(3,94)	1:716:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	20	0.22
(1,933)	1:629:A:ASP:H	1:628:A:PRO:HA	15	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	8	0.22
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	6	0.22
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	18	0.22
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	1	0.22
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB1	10	0.22
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	6	0.22
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	11	0.22
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	9	0.22
(1,528)	1:637:A:ALA:HB2	1:635:A:LEU:HA	2	0.22
(1,528)	1:637:A:ALA:HB3	1:635:A:LEU:HA	16	0.22
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE1	15	0.22
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	4	0.22
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	4	0.22
(1,314)	1:634:A:TRP:HE3	1:637:A:ALA:HB1	1	0.22
(1,253)	1:634:A:TRP:HZ2	1:635:A:LEU:HD12	9	0.22
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD21	18	0.22
(1,87)	1:700:A:ALA:HA	1:709:A:ALA:HB1	12	0.22
(1,87)	1:700:A:ALA:HA	1:709:A:ALA:HB1	18	0.22
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	11	0.21
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	12	0.21
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	17	0.21
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	16	0.21
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	18	0.21
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	6	0.21
(3,131)	1:638:A:LEU:HD11	1:634:A:TRP:HB2	19	0.21
(3,125)	1:684:A:LYS:HG3	1:689:A:SER:HB2	20	0.21
(3,124)	1:635:A:LEU:HD22	1:638:A:LEU:HA	15	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB1	1:672:A:ALA:HB2	2	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB1	12	0.21
(3,98)	1:669:A:ALA:HB2	1:672:A:ALA:HB1	13	0.21
(3,95)	1:719:A:ALA:HB3	1:720:A:TRP:HD1	16	0.21
(3,94)	1:716:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	16	0.21
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB2	18	0.21
(3,56)	1:722:A:GLN:HG3	1:719:A:ALA:HA	18	0.21
(3,44)	1:664:A:ARG:HD2	1:668:A:LEU:HD13	13	0.21
(1,1166)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:H	11	0.21
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD23	6	0.21
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD22	20	0.21
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	11	0.21
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	16	0.21
(1,823)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HB3	3	0.21
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	18	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,726)	1:672:A:ALA:H	1:671:A:GLU:HG3	13	0.21
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	13	0.21
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	18	0.21
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB3	19	0.21
(1,430)	1:708:A:LEU:HG	1:705:A:LYS:HB2	8	0.21
(1,429)	1:708:A:LEU:HD11	1:708:A:LEU:HG	6	0.21
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	8	0.21
(1,333)	1:716:A:ALA:HB3	1:715:A:LYS:HD2	10	0.21
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	12	0.21
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB3	1	0.21
(1,299)	1:694:A:THR:HG22	1:716:A:ALA:HB1	10	0.21
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD23	14	0.21
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	14	0.21
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	15	0.21
(3,338)	1:654:A:GLY:H	1:654:A:GLY:HA2	19	0.2
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	2	0.2
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	6	0.2
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	8	0.2
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	19	0.2
(3,221)	1:664:A:ARG:H	1:662:A:GLU:HB3	7	0.2
(3,121)	1:709:A:ALA:HB1	1:638:A:LEU:HD23	17	0.2
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	12	0.2
(3,94)	1:716:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	13	0.2
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG21	2	0.2
(3,84)	1:643:A:THR:HG23	1:643:A:THR:HB	7	0.2
(3,84)	1:643:A:THR:HG22	1:643:A:THR:HB	8	0.2
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD22	11	0.2
(1,892)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:H	15	0.2
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	12	0.2
(1,698)	1:637:A:ALA:H	1:636:A:GLU:HB2	1	0.2
(1,656)	1:719:A:ALA:H	1:718:A:GLU:HB2	14	0.2
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	9	0.2
(1,497)	1:666:A:MET:HE3	1:663:A:PRO:HA	6	0.2
(1,495)	1:710:A:ASN:H	1:637:A:ALA:HB2	12	0.2
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE2	14	0.2
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	5	0.2
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	10	0.2
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	13	0.2
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	14	0.2
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	15	0.2
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	10	0.2
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD22	16	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	1	0.2
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	5	0.19
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB2	3	0.19
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	14	0.19
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB1	18	0.19
(3,98)	1:669:A:ALA:HB2	1:672:A:ALA:HB3	19	0.19
(3,95)	1:719:A:ALA:HB2	1:720:A:TRP:HD1	5	0.19
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	6	0.19
(3,84)	1:643:A:THR:HG22	1:643:A:THR:HB	11	0.19
(3,84)	1:643:A:THR:HG23	1:643:A:THR:HB	13	0.19
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	20	0.19
(3,57)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG2	18	0.19
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	12	0.19
(1,1231)	1:656:A:TYR:H	1:626:A:MET:HB3	7	0.19
(1,1162)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HB2	17	0.19
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	20	0.19
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	18	0.19
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	15	0.19
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	19	0.19
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	17	0.19
(1,524)	1:635:A:LEU:HD13	1:706:A:GLY:HA3	11	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	2	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	3	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	7	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	9	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD13	1:708:A:LEU:HG	11	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD11	1:708:A:LEU:HG	12	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD11	1:708:A:LEU:HG	18	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	19	0.19
(1,429)	1:708:A:LEU:HD11	1:708:A:LEU:HG	20	0.19
(1,428)	1:635:A:LEU:HD13	1:635:A:LEU:HA	17	0.19
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB3	1	0.19
(1,322)	1:665:A:TYR:HD2	1:699:A:ALA:HB2	13	0.19
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB2	5	0.19
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB1	12	0.19
(1,251)	1:668:A:LEU:HD21	1:664:A:ARG:HD2	17	0.19
(1,71)	1:655:A:GLU:HA	1:626:A:MET:HB3	11	0.19
(3,338)	1:654:A:GLY:H	1:654:A:GLY:HA2	1	0.18
(3,338)	1:654:A:GLY:H	1:654:A:GLY:HA2	14	0.18
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	1	0.18
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	20	0.18
(3,125)	1:684:A:LYS:HG3	1:689:A:SER:HB2	18	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	1	0.18
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	2	0.18
(3,92)	1:637:A:ALA:HB2	1:648:A:THR:HG23	4	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG22	1:643:A:THR:HB	3	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG22	1:643:A:THR:HB	6	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG21	1:643:A:THR:HB	10	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG21	1:643:A:THR:HB	16	0.18
(3,84)	1:643:A:THR:HG21	1:643:A:THR:HB	19	0.18
(3,52)	1:710:A:ASN:HB3	1:638:A:LEU:HD21	12	0.18
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	4	0.18
(1,904)	1:709:A:ALA:H	1:708:A:LEU:HB3	1	0.18
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	4	0.18
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	19	0.18
(1,845)	1:630:A:ARG:H	1:631:A:CYS:H	13	0.18
(1,781)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HG2	1	0.18
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	2	0.18
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	7	0.18
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	10	0.18
(1,654)	1:657:A:ASP:H	1:657:A:ASP:HB2	20	0.18
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	17	0.18
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE3	8	0.18
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	1	0.18
(1,429)	1:708:A:LEU:HD12	1:708:A:LEU:HG	17	0.18
(1,360)	1:674:A:MET:HE1	1:682:A:LEU:HD22	20	0.18
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	5	0.18
(1,246)	1:692:A:LEU:HD11	1:671:A:GLU:HB2	5	0.18
(1,138)	1:684:A:LYS:HE3	1:686:A:PRO:HG3	19	0.18
(1,93)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	2	0.18
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	17	0.18
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE2	18	0.18
(3,396)	1:706:A:GLY:H	1:703:A:ALA:HA	15	0.17
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	1	0.17
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	4	0.17
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	20	0.17
(3,148)	1:706:A:GLY:HA2	1:638:A:LEU:HD11	6	0.17
(3,121)	1:709:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD13	12	0.17
(3,94)	1:716:A:ALA:HB2	1:714:A:GLN:HB2	3	0.17
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	14	0.17
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	1	0.17
(3,84)	1:643:A:THR:HG23	1:643:A:THR:HB	5	0.17
(3,84)	1:643:A:THR:HG23	1:643:A:THR:HB	9	0.17
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	12	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	12	0.17
(3,67)	1:701:A:MET:HB2	1:638:A:LEU:HD22	10	0.17
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	6	0.17
(1,1160)	1:722:A:GLN:H	1:686:A:PRO:HB2	10	0.17
(1,904)	1:709:A:ALA:H	1:708:A:LEU:HB3	6	0.17
(1,904)	1:709:A:ALA:H	1:708:A:LEU:HB3	7	0.17
(1,898)	1:659:A:MET:H	1:659:A:MET:HB2	13	0.17
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	1	0.17
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	7	0.17
(1,837)	1:646:A:GLU:H	1:645:A:LEU:H	19	0.17
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	11	0.17
(1,729)	1:724:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HB3	16	0.17
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	5	0.17
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	6	0.17
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	13	0.17
(1,581)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:HA	15	0.17
(1,524)	1:635:A:LEU:HD12	1:706:A:GLY:HA3	12	0.17
(1,497)	1:666:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	15	0.17
(1,429)	1:708:A:LEU:HD11	1:708:A:LEU:HG	16	0.17
(1,300)	1:677:A:THR:HG23	1:673:A:GLU:HG3	14	0.17
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD23	13	0.17
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	12	0.17
(1,1)	1:659:A:MET:HE2	1:663:A:PRO:HA	8	0.17
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	12	0.16
(3,325)	1:722:A:GLN:H	1:686:A:PRO:HG3	3	0.16
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	13	0.16
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	16	0.16
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	16	0.16
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	2	0.16
(3,161)	1:632:A:GLN:HG3	1:635:A:LEU:HD11	13	0.16
(3,94)	1:716:A:ALA:HB1	1:714:A:GLN:HB2	7	0.16
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG22	4	0.16
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG22	18	0.16
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	4	0.16
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	4	0.16
(2,5)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:H	4	0.16
(1,1160)	1:722:A:GLN:H	1:686:A:PRO:HB2	13	0.16
(1,1046)	1:658:A:GLY:H	1:657:A:ASP:HA	16	0.16
(1,939)	1:723:A:MET:H	1:723:A:MET:HG2	3	0.16
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	2	0.16
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	20	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,729)	1:724:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HB3	2	0.16
(1,673)	1:649:A:ASP:H	1:649:A:ASP:HB3	18	0.16
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	11	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	2	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	3	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	8	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	10	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	11	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	12	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	14	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	18	0.16
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	19	0.16
(1,527)	1:637:A:ALA:HB1	1:633:A:ASP:HB2	8	0.16
(1,527)	1:637:A:ALA:HB3	1:633:A:ASP:HB2	10	0.16
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE3	4	0.16
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB1	3	0.16
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD21	7	0.16
(1,80)	1:716:A:ALA:HA	1:715:A:LYS:HE2	12	0.16
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	1	0.15
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	4	0.15
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	20	0.15
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG3	6	0.15
(3,281)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	20	0.15
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	6	0.15
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD22	15	0.15
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD13	20	0.15
(3,131)	1:638:A:LEU:HD11	1:634:A:TRP:HB2	8	0.15
(3,129)	1:631:A:CYS:HB2	1:634:A:TRP:HB3	8	0.15
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB3	1	0.15
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB1	8	0.15
(3,95)	1:719:A:ALA:HB3	1:720:A:TRP:HD1	17	0.15
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	19	0.15
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	3	0.15
(3,28)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HB2	2	0.15
(3,27)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG2	1	0.15
(1,1203)	1:642:A:ASN:H	1:640:A:TRP:HA	12	0.15
(1,1027)	1:678:A:GLY:H	1:679:A:GLY:HA2	4	0.15
(1,904)	1:709:A:ALA:H	1:708:A:LEU:HB3	9	0.15
(1,895)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:HA2	13	0.15
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	16	0.15
(1,834)	1:711:A:GLN:H	1:710:A:ASN:HB2	1	0.15
(1,781)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HG2	18	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	20	0.15
(1,734)	1:634:A:TRP:H	1:633:A:ASP:HB2	17	0.15
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	1	0.15
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	4	0.15
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	15	0.15
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	16	0.15
(1,591)	1:693:A:TYR:H	1:693:A:TYR:HB3	20	0.15
(1,365)	1:700:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HE2	6	0.15
(1,362)	1:667:A:MET:HE3	1:668:A:LEU:HD11	3	0.15
(1,335)	1:697:A:ALA:HB3	1:713:A:TYR:HE2	9	0.15
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB1	16	0.15
(1,299)	1:694:A:THR:HG22	1:716:A:ALA:HB3	7	0.15
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	10	0.15
(1,277)	1:708:A:LEU:HD13	1:707:A:ARG:HG3	19	0.15
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD23	6	0.15
(1,260)	1:682:A:LEU:HD11	1:674:A:MET:HE3	10	0.15
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	4	0.15
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	15	0.15
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	20	0.15
(1,87)	1:700:A:ALA:HA	1:709:A:ALA:HB3	9	0.15
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	3	0.15
(1,70)	1:722:A:GLN:HA	1:723:A:MET:HE1	19	0.15
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	2	0.14
(3,338)	1:654:A:GLY:H	1:654:A:GLY:HA2	17	0.14
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG2	8	0.14
(3,289)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HG	3	0.14
(3,287)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HA	18	0.14
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	8	0.14
(3,125)	1:684:A:LYS:HG3	1:689:A:SER:HB2	1	0.14
(3,94)	1:716:A:ALA:HB3	1:714:A:GLN:HB2	11	0.14
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	15	0.14
(3,9)	1:670:A:ARG:HA	1:670:A:ARG:HG2	1	0.14
(1,1168)	1:655:A:GLU:H	1:656:A:TYR:H	20	0.14
(1,1026)	1:695:A:GLN:HE21	1:692:A:LEU:HD23	2	0.14
(1,990)	1:687:A:GLN:HE21	1:720:A:TRP:HZ2	17	0.14
(1,895)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:HA2	8	0.14
(1,895)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:HA2	9	0.14
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	10	0.14
(1,803)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HB3	5	0.14
(1,800)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HB2	9	0.14
(1,798)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HA	7	0.14
(1,711)	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:HB3	6	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,701)	1:652:A:GLU:H	1:652:A:GLU:HB3	11	0.14
(1,608)	1:725:A:GLU:H	1:725:A:GLU:HB3	17	0.14
(1,549)	1:680:A:TYR:HE2	1:680:A:TYR:HA	3	0.14
(1,497)	1:666:A:MET:HE3	1:663:A:PRO:HA	18	0.14
(1,490)	1:674:A:MET:HE1	1:670:A:ARG:HD2	5	0.14
(1,422)	1:635:A:LEU:HD12	1:636:A:GLU:HB2	15	0.14
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB1	13	0.14
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	15	0.14
(1,276)	1:708:A:LEU:HD11	1:666:A:MET:HG2	8	0.14
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD22	4	0.14
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD23	14	0.14
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	6	0.14
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	8	0.14
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	19	0.14
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	8	0.14
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	18	0.13
(3,362)	1:692:A:LEU:H	1:695:A:GLN:HA	10	0.13
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG3	14	0.13
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	13	0.13
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB3	1	0.13
(3,175)	1:700:A:ALA:HB1	1:699:A:ALA:HA	18	0.13
(3,125)	1:715:A:LYS:HG2	1:714:A:GLN:HA	14	0.13
(3,119)	1:712:A:TYR:HD2	1:710:A:ASN:HB2	13	0.13
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG23	14	0.13
(3,74)	1:707:A:ARG:HG3	1:711:A:GLN:HA	6	0.13
(3,57)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG3	2	0.13
(3,28)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HB2	8	0.13
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	18	0.13
(3,27)	1:630:A:ARG:HA	1:632:A:GLN:HG3	15	0.13
(3,13)	1:702:A:GLU:HA	1:635:A:LEU:HD11	19	0.13
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	10	0.13
(1,1154)	1:711:A:GLN:H	1:711:A:GLN:HG3	17	0.13
(1,1045)	1:665:A:TYR:H	1:663:A:PRO:HB3	7	0.13
(1,1027)	1:678:A:GLY:H	1:679:A:GLY:HA2	14	0.13
(1,1008)	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:HD21	3	0.13
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	19	0.13
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	20	0.13
(1,904)	1:709:A:ALA:H	1:708:A:LEU:HB3	17	0.13
(1,892)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:H	5	0.13
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	16	0.13
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	13	0.13
(1,727)	1:724:A:GLU:H	1:723:A:MET:H	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	5	0.13
(1,649)	1:651:A:ASP:H	1:650:A:CYS:HA	3	0.13
(1,497)	1:666:A:MET:HE1	1:663:A:PRO:HA	2	0.13
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	11	0.13
(1,365)	1:700:A:ALA:HB2	1:665:A:TYR:HE2	11	0.13
(1,360)	1:674:A:MET:HE3	1:682:A:LEU:HD22	5	0.13
(1,280)	1:635:A:LEU:HA	1:635:A:LEU:HD21	1	0.13
(1,182)	1:671:A:GLU:HG3	1:692:A:LEU:HD23	11	0.13
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD22	13	0.13
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	16	0.13
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	19	0.13
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	16	0.12
(3,338)	1:654:A:GLY:H	1:653:A:GLY:HA2	9	0.12
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG2	10	0.12
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG3	17	0.12
(3,289)	1:645:A:LEU:H	1:645:A:LEU:HG	9	0.12
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	5	0.12
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	20	0.12
(3,275)	1:646:A:GLU:H	1:646:A:GLU:HA	4	0.12
(3,206)	1:712:A:TYR:HE2	1:699:A:ALA:HB1	9	0.12
(3,196)	1:634:A:TRP:HZ2	1:638:A:LEU:HB2	3	0.12
(3,189)	1:641:A:TYR:HE2	1:714:A:GLN:HG2	19	0.12
(3,175)	1:700:A:ALA:HB3	1:699:A:ALA:HA	5	0.12
(3,169)	1:715:A:LYS:HD3	1:719:A:ALA:HA	13	0.12
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB1	19	0.12
(3,162)	1:712:A:TYR:HE2	1:669:A:ALA:HB1	20	0.12
(3,147)	1:706:A:GLY:HA2	1:711:A:GLN:HB2	9	0.12
(3,95)	1:719:A:ALA:HB1	1:720:A:TRP:HD1	4	0.12
(3,87)	1:713:A:TYR:HE2	1:709:A:ALA:HB3	17	0.12
(3,84)	1:643:A:THR:HA	1:643:A:THR:HG21	17	0.12
(3,28)	1:722:A:GLN:HA	1:724:A:GLU:HB3	7	0.12
(1,1160)	1:722:A:GLN:H	1:686:A:PRO:HB2	3	0.12
(1,1032)	1:653:A:GLY:H	1:653:A:GLY:HA2	20	0.12
(1,1005)	1:689:A:SER:H	1:684:A:LYS:HA	2	0.12
(1,895)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:HA2	7	0.12
(1,837)	1:646:A:GLU:H	1:645:A:LEU:H	14	0.12
(1,821)	1:660:A:GLN:H	1:660:A:GLN:HG2	20	0.12
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	1	0.12
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	4	0.12
(1,660)	1:662:A:GLU:H	1:661:A:ASP:HA	18	0.12
(1,651)	1:657:A:ASP:H	1:658:A:GLY:H	12	0.12
(1,605)	1:725:A:GLU:H	1:724:A:GLU:HA	9	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	18	0.12
(1,480)	1:628:A:PRO:HD2	1:627:A:SER:HA	9	0.12
(1,312)	1:701:A:MET:HG2	1:709:A:ALA:HB1	18	0.12
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB1	16	0.12
(1,124)	1:668:A:LEU:HB3	1:692:A:LEU:HD22	4	0.12
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	3	0.12
(1,121)	1:630:A:ARG:HD2	1:630:A:ARG:HG2	12	0.12
(1,74)	1:709:A:ALA:HA	1:713:A:TYR:HA	11	0.12
(3,371)	1:694:A:THR:H	1:692:A:LEU:HG	13	0.11
(3,324)	1:722:A:GLN:H	1:722:A:GLN:HG2	5	0.11
(3,283)	1:676:A:PHE:H	1:675:A:LEU:HB3	15	0.11
(3,256)	1:708:A:LEU:H	1:705:A:LYS:HB2	7	0.11
(3,188)	1:665:A:TYR:HE2	1:705:A:LYS:HD2	13	0.11
(3,175)	1:700:A:ALA:HB1	1:699:A:ALA:HA	10	0.11
(3,175)	1:700:A:ALA:HB1	1:699:A:ALA:HA	12	0.11
(3,175)	1:700:A:ALA:HB3	1:699:A:ALA:HA	14	0.11
(3,175)	1:700:A:ALA:HB2	1:699:A:ALA:HA	17	0.11
(3,164)	1:719:A:ALA:HB1	1:717:A:GLU:HG2	14	0.11
(3,121)	1:709:A:ALA:HB2	1:638:A:LEU:HD23	16	0.11
(3,83)	1:638:A:LEU:HD21	1:634:A:TRP:HB2	2	0.11
(3,72)	1:637:A:ALA:HA	1:640:A:TRP:HB3	14	0.11
(3,68)	1:676:A:PHE:HZ	1:718:A:GLU:HB2	6	0.11
(3,68)	1:676:A:PHE:HZ	1:718:A:GLU:HB2	19	0.11
(3,17)	1:712:A:TYR:HD2	1:712:A:TYR:HA	2	0.11
(3,17)	1:712:A:TYR:HD2	1:712:A:TYR:HA	6	0.11
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	6	0.11
(2,6)	1:712:A:TYR:HE2	1:711:A:GLN:HE22	19	0.11
(2,5)	1:712:A:TYR:HE2	1:665:A:TYR:H	15	0.11
(2,4)	1:664:A:ARG:HG2	1:663:A:PRO:HB3	4	0.11
(1,1190)	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:HE22	14	0.11
(1,1168)	1:655:A:GLU:H	1:656:A:TYR:H	8	0.11
(1,1154)	1:711:A:GLN:H	1:711:A:GLN:HG3	3	0.11
(1,1154)	1:711:A:GLN:H	1:711:A:GLN:HG3	5	0.11
(1,1045)	1:665:A:TYR:H	1:663:A:PRO:HB3	6	0.11
(1,1007)	1:689:A:SER:H	1:688:A:ARG:HB2	9	0.11
(1,994)	1:643:A:THR:H	1:642:A:ASN:HA	5	0.11
(1,970)	1:722:A:GLN:H	1:725:A:GLU:HB2	7	0.11
(1,895)	1:659:A:MET:H	1:658:A:GLY:HA2	16	0.11
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	9	0.11
(1,878)	1:680:A:TYR:H	1:679:A:GLY:HA2	14	0.11
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	5	0.11
(1,840)	1:718:A:GLU:H	1:717:A:GLU:HB3	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,834)	1:711:A:GLN:H	1:710:A:ASN:HB2	6	0.11
(1,800)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HB2	7	0.11
(1,800)	1:661:A:ASP:H	1:660:A:GLN:HB2	12	0.11
(1,780)	1:705:A:LYS:H	1:705:A:LYS:HB3	8	0.11
(1,621)	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:H	2	0.11
(1,616)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HA	13	0.11
(1,616)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HA	14	0.11
(1,616)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HA	15	0.11
(1,616)	1:644:A:ALA:H	1:644:A:ALA:HA	17	0.11
(1,528)	1:637:A:ALA:HB1	1:635:A:LEU:HA	17	0.11
(1,486)	1:698:A:GLU:HG3	1:701:A:MET:HE1	17	0.11
(1,480)	1:628:A:PRO:HD2	1:627:A:SER:HA	17	0.11
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB2	9	0.11
(1,469)	1:721:A:ALA:HA	1:644:A:ALA:HB1	16	0.11
(1,299)	1:694:A:THR:HG23	1:716:A:ALA:HB2	2	0.11
(1,290)	1:692:A:LEU:HD21	1:692:A:LEU:HB2	7	0.11
(1,255)	1:645:A:LEU:HD12	1:645:A:LEU:HA	14	0.11
(1,255)	1:645:A:LEU:HD11	1:645:A:LEU:HA	19	0.11
(1,252)	1:668:A:LEU:HD21	1:668:A:LEU:HG	18	0.11
(1,186)	1:711:A:GLN:HG2	1:707:A:ARG:HG2	16	0.11
(1,104)	1:628:A:PRO:HD2	1:655:A:GLU:HG2	10	0.11
(3,209)	1:640:A:TRP:HD1	1:638:A:LEU:HD11	13	0.1
(3,175)	1:700:A:ALA:HB1	1:699:A:ALA:HA	4	0.1
(3,175)	1:700:A:ALA:HB2	1:699:A:ALA:HA	6	0.1
(3,175)	1:700:A:ALA:HB3	1:699:A:ALA:HA	7	0.1
(3,175)	1:700:A:ALA:HB2	1:699:A:ALA:HA	9	0.1
(3,175)	1:700:A:ALA:HB2	1:699:A:ALA:HA	11	0.1
(3,175)	1:700:A:ALA:HB3	1:699:A:ALA:HA	15	0.1
(3,98)	1:669:A:ALA:HB3	1:672:A:ALA:HB2	11	0.1
(3,95)	1:719:A:ALA:HB3	1:720:A:TRP:HD1	10	0.1
(3,88)	1:703:A:ALA:HB3	1:704:A:MET:HB2	8	0.1
(3,80)	1:708:A:LEU:HD11	1:705:A:LYS:HE2	10	0.1
(3,75)	1:628:A:PRO:HG2	1:657:A:ASP:HB2	5	0.1
(3,17)	1:712:A:TYR:HD2	1:712:A:TYR:HA	7	0.1
(1,891)	1:660:A:GLN:H	1:659:A:MET:H	7	0.1
(1,866)	1:666:A:MET:H	1:663:A:PRO:HB3	18	0.1
(1,859)	1:703:A:ALA:H	1:702:A:GLU:HB2	3	0.1
(1,734)	1:634:A:TRP:H	1:633:A:ASP:HB2	14	0.1
(1,615)	1:644:A:ALA:H	1:645:A:LEU:H	20	0.1
(1,592)	1:713:A:TYR:H	1:713:A:TYR:HB3	17	0.1
(1,383)	1:686:A:PRO:HG2	1:723:A:MET:HG3	19	0.1
(1,305)	1:703:A:ALA:HB1	1:665:A:TYR:HD2	20	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,274)	1:682:A:LEU:HA	1:682:A:LEU:HD23	1	0.1
(1,252)	1:668:A:LEU:HD23	1:668:A:LEU:HG	14	0.1
(1,133)	1:675:A:LEU:HB2	1:692:A:LEU:HD21	17	0.1
(1,87)	1:700:A:ALA:HA	1:709:A:ALA:HB1	7	0.1
(1,87)	1:700:A:ALA:HA	1:709:A:ALA:HB1	16	0.1

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

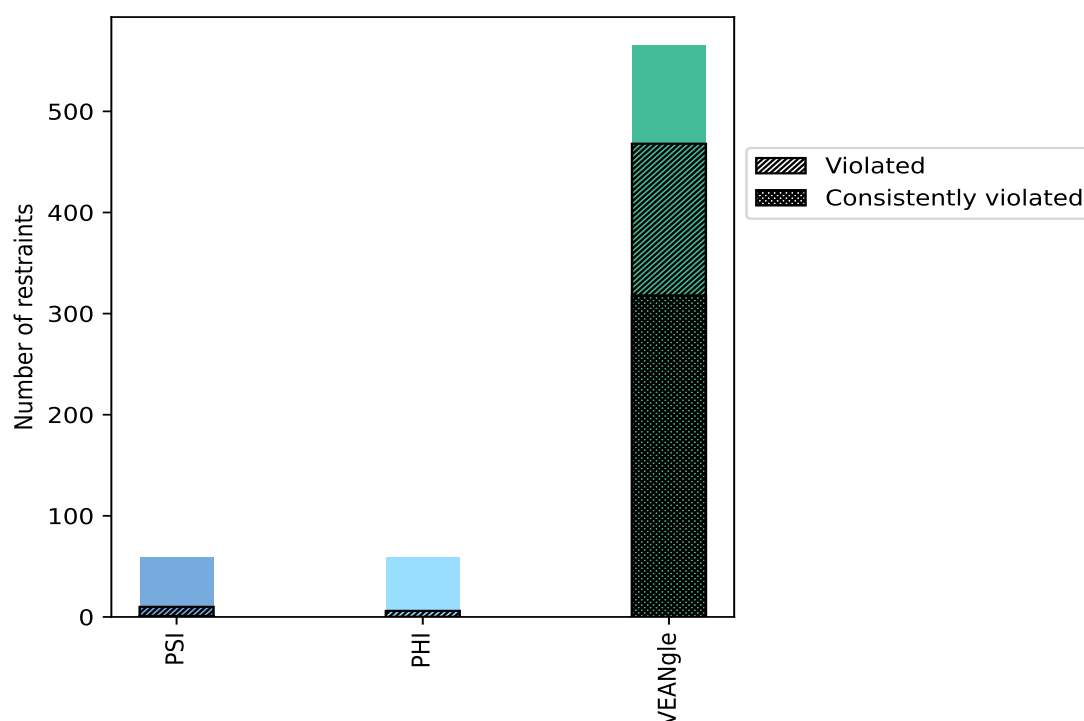
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PSI	59	8.6	10	16.9	1.5	1	1.7	0.1
PHI	59	8.6	6	10.2	0.9	0	0.0	0.0
VEAngle	565	82.7	468	82.8	68.5	318	56.3	46.6
Total	683	100.0	484	70.9	70.9	319	46.7	46.7

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

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



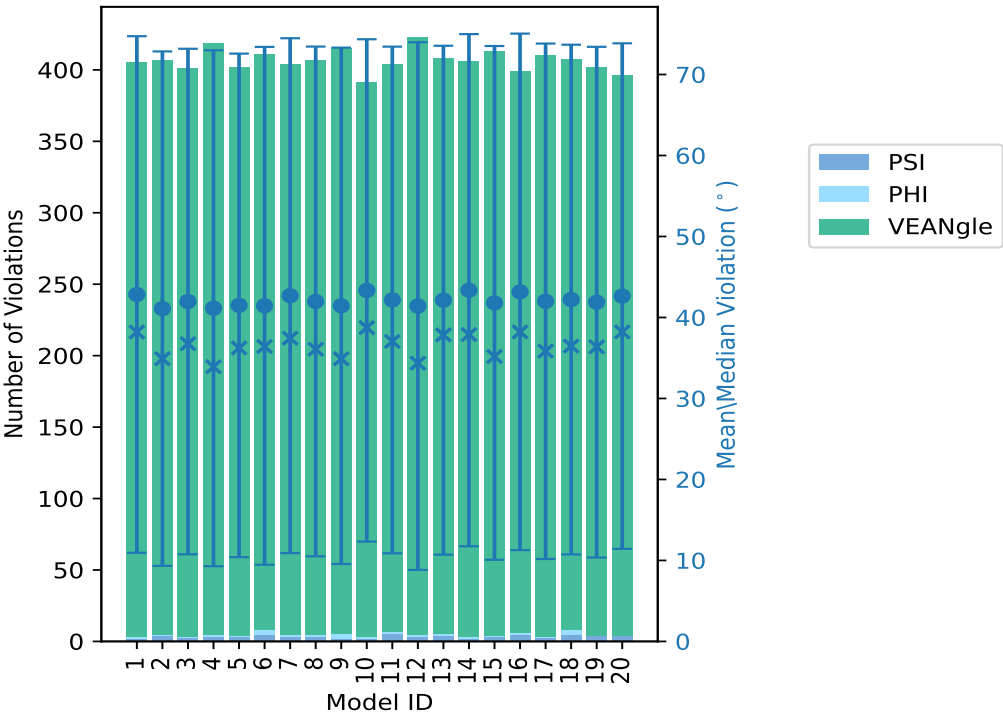
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

Model ID	Number of violations				Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PSI	PHI	VEAngle	Total				
1	2	1	402	405	42.84	124.97	31.89	38.2
2	4	1	402	407	41.09	118.67	31.76	34.91
3	3	0	398	401	41.97	120.32	31.21	36.77
4	3	2	414	419	41.14	121.83	31.85	33.91
5	3	1	398	402	41.49	117.98	31.09	36.24
6	5	3	403	411	41.44	123.12	31.97	36.42
7	3	2	399	404	42.69	121.91	31.79	37.44
8	3	2	402	407	41.98	125.54	31.47	36.08
9	2	3	410	415	41.44	121.82	31.88	34.9
10	2	1	388	391	43.34	121.27	31.01	38.75
11	5	2	397	404	42.16	121.62	31.28	37.04
12	3	2	418	423	41.41	120.13	32.58	34.36
13	4	1	403	408	42.13	125.66	31.42	37.85
14	2	1	403	406	43.37	125.2	31.62	37.89
15	3	1	409	413	41.8	123.41	31.72	35.18
16	5	1	393	399	43.16	123.61	31.89	38.22
17	3	0	407	410	42.0	120.96	31.82	35.85
18	5	3	399	407	42.21	119.85	31.47	36.47
19	4	0	398	402	41.89	118.26	31.53	36.37
20	4	0	392	396	42.64	119.53	31.21	38.22

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



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

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

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

Number of violated restraints				Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	VEAngle	Total	Count ¹	%
2	3	10	15	1	5.0
1	1	9	11	2	10.0
0	0	11	11	3	15.0
2	0	6	8	4	20.0
1	0	3	4	5	25.0
1	0	5	6	6	30.0
0	0	7	7	7	35.0
0	0	8	8	8	40.0
1	0	4	5	9	45.0
0	1	7	8	10	50.0
0	0	4	4	11	55.0

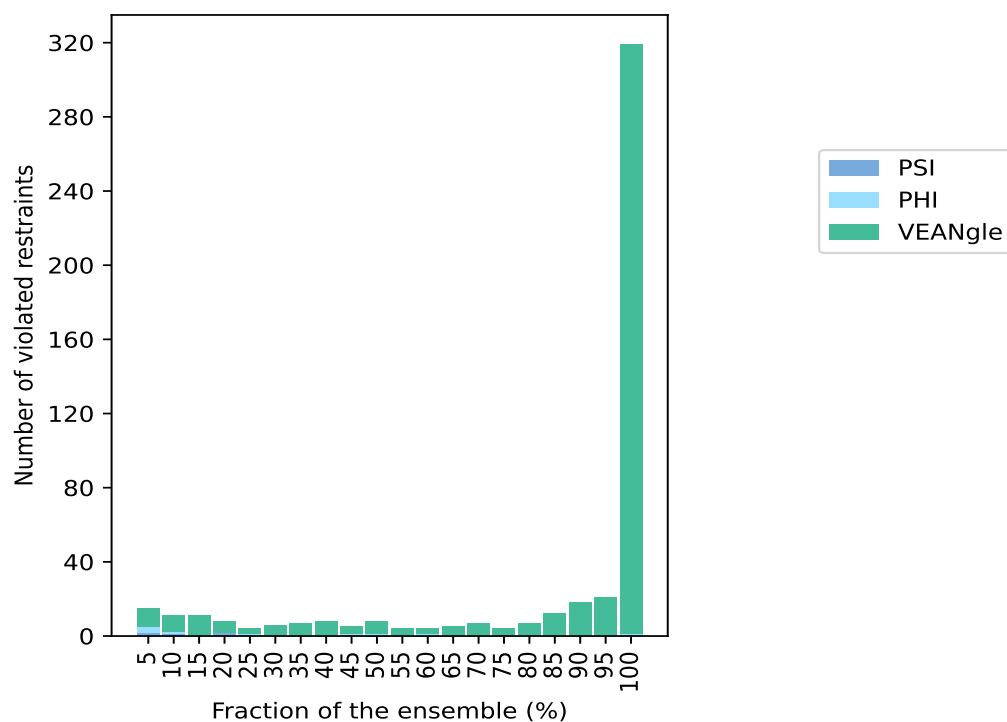
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints				Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	VEANgle	Total	Count ¹	%
0	1	3	4	12	60.0
0	0	5	5	13	65.0
0	0	7	7	14	70.0
0	0	4	4	15	75.0
1	0	6	7	16	80.0
0	0	12	12	17	85.0
0	0	18	18	18	90.0
0	0	21	21	19	95.0
1	0	318	319	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

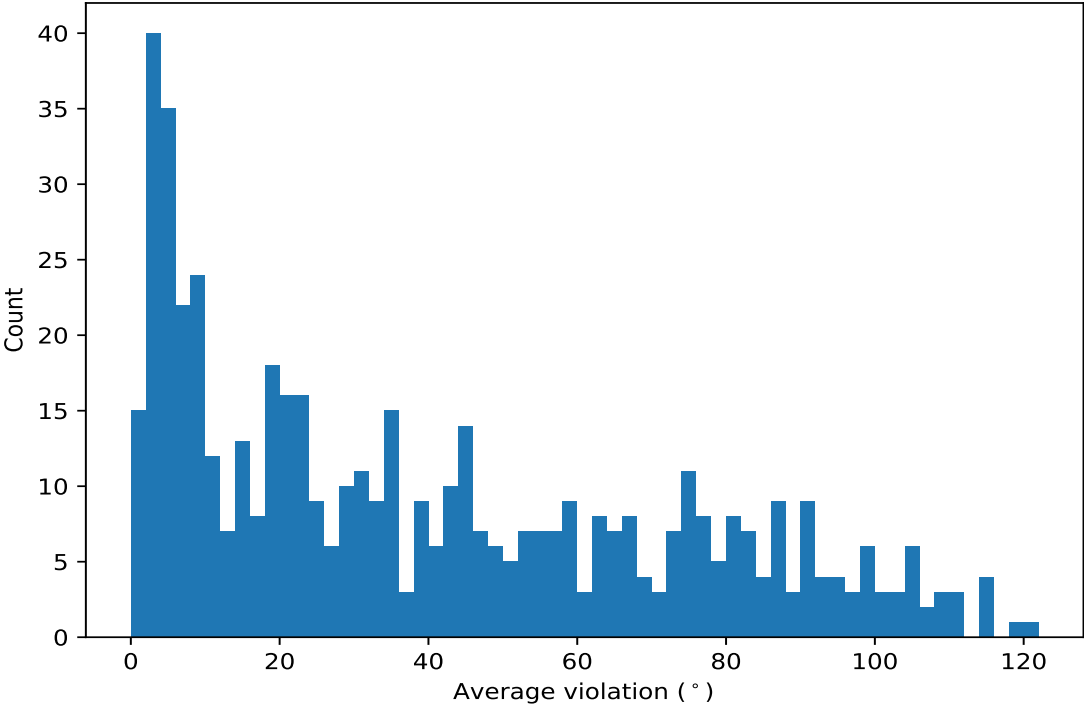


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints ⓘ

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	120.4	3.5	120.44
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	119.54	1.72	119.31
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	114.4	4.93	114.8
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	114.4	4.93	114.8
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	114.0	3.93	112.45
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	114.0	3.93	112.45
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	111.03	2.91	111.5
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	110.23	3.57	111.74
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	110.23	3.57	111.74
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	20	109.99	3.92	109.74
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	20	109.99	3.92	109.74
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	108.76	5.57	109.45
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	107.87	5.02	107.82
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	107.87	5.02	107.82
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	105.34	2.77	105.34
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	105.03	3.98	103.86
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	104.59	10.27	108.7
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	104.59	10.27	108.7
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	104.06	3.79	105.32
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	104.06	3.79	105.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	20	102.3	3.96	101.02
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	102.02	4.19	101.19
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	102.02	4.19	101.19
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	101.44	5.86	101.74
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	101.26	4.34	101.82
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	100.24	3.46	100.16
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	20	98.65	1.98	98.48
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	98.54	5.45	99.11
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	98.54	5.45	99.11
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	98.27	4.45	99.12
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	98.27	4.45	99.12
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	98.05	3.95	97.68
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	96.94	5.73	97.99
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	96.31	7.48	93.69
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	96.31	7.48	93.69
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	20	95.4	1.39	95.68
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	95.26	10.57	95.5
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	95.26	10.57	95.5
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	95.16	5.1	94.71
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	93.05	6.6	93.52
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	92.28	2.08	92.37
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	91.47	3.7	91.22
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	91.43	10.1	94.77
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	91.43	10.1	94.77
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	91.08	2.58	91.14
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	91.08	2.58	91.14
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	91.07	15.24	96.58
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	91.07	15.24	96.58
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	20	90.99	2.38	90.65
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	20	90.44	2.37	90.3
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	89.78	3.97	89.68
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	88.77	3.47	87.95
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	88.11	6.92	88.32
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	87.91	10.0	87.51
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	87.72	10.27	85.77
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	87.7	3.07	87.39
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	87.61	9.57	85.87
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	87.28	5.21	89.83
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	87.28	5.21	89.83
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	86.7	6.88	86.22
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	86.7	6.88	86.22
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	86.2	0.94	86.27
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	85.92	8.38	86.68
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	85.43	4.47	85.47
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	85.09	5.82	86.71
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	84.12	6.36	83.54
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	83.92	7.67	86.44
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	83.92	7.67	86.44
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	83.76	3.84	83.26
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	82.53	8.82	83.52
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	82.43	1.52	82.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	81.6	8.73	82.01
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	81.58	1.39	81.44
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	81.34	7.83	82.4
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	81.04	3.44	81.48
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	80.64	12.7	81.76
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	80.64	12.7	81.76
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	80.47	1.89	80.64
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	80.24	9.45	80.98
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	79.75	26.24	88.36
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	79.75	26.24	88.36
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	79.64	13.91	80.37
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	79.64	13.91	80.37
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	78.39	2.11	78.94
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	77.93	3.11	77.0
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	77.62	8.26	79.19
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	77.58	8.37	76.76
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	76.6	8.71	76.56
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	76.52	1.82	76.29
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	76.52	4.31	77.63
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	76.05	10.72	77.68
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	76.05	10.72	77.68
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	75.86	3.98	74.99
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	75.19	6.37	74.68
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	74.85	3.28	75.18
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	74.69	1.24	74.83
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	20	74.4	16.74	73.69
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	74.23	1.69	74.76
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	74.2	3.19	73.74
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	74.17	7.31	72.32
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	74.15	7.8	71.61
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	74.15	7.8	71.61
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	74.13	3.38	74.71
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	73.65	3.95	74.69
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	73.28	13.95	73.42
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	73.28	12.88	75.1
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	73.28	12.88	75.1
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	72.45	5.48	72.68
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	72.15	3.68	71.81
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	72.0	3.29	72.76
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	71.11	2.45	70.99
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	70.86	1.6	70.66
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	70.13	3.55	70.15
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	68.41	2.24	68.56
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	68.26	6.59	68.63
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	68.2	21.62	74.4
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	68.2	21.62	74.4
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	67.85	2.92	67.3
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	67.79	8.68	66.44
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	67.37	6.02	67.48
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	67.15	8.7	65.02
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	66.86	16.36	69.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	66.86	16.36	69.48
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	66.84	5.92	68.1
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	66.06	7.19	63.58
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	65.83	2.59	65.92
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	65.5	14.49	68.06
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	65.02	8.56	64.32
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	64.98	4.19	64.51
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	64.66	2.9	64.36
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	64.6	12.86	64.44
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	64.24	1.42	63.99
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	63.92	0.73	63.87
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	63.61	2.87	63.26
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	63.4	6.57	64.59
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	63.17	1.77	62.93
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	63.04	3.21	62.83
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	62.57	1.28	62.48
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	62.45	5.8	61.24
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	62.23	7.59	62.64
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	60.68	1.92	60.74
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	60.03	7.01	58.32
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	60.02	3.23	59.71
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	59.21	1.33	59.04
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	59.15	13.19	58.78
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	59.15	13.19	58.78
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	58.99	2.18	58.7
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	58.85	3.29	59.25
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	58.72	2.43	59.09
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	58.38	3.29	58.23
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	58.26	2.31	57.72
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	58.11	6.13	58.24
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	57.93	8.14	57.9
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	57.63	2.31	57.42
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	57.18	5.96	57.54
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	56.63	1.86	56.36
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	56.32	1.19	56.04
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	56.23	2.54	56.18
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	56.05	0.83	55.98
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	55.77	2.48	55.54
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	55.41	3.6	56.03
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	20	54.84	2.06	55.18
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	54.81	7.31	54.36
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	54.51	0.94	54.56
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	54.28	5.49	55.11
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	54.1	4.71	52.87
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	53.86	1.78	53.52
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	53.61	8.99	52.36
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	53.6	1.2	53.74
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	53.09	1.54	52.8
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	52.33	7.34	51.24
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	52.3	1.63	51.78
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	52.18	16.59	50.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	51.26	3.29	50.83
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	51.0	22.88	48.65
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	50.49	4.12	51.1
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	50.31	1.09	50.15
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	50.23	4.4	49.98
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	49.76	7.11	48.32
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	49.47	1.44	49.44
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	49.36	3.99	50.18
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	48.5	6.24	49.33
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	48.13	3.67	48.0
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	48.06	4.48	49.53
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	47.94	2.08	47.88
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	47.39	2.76	46.9
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	47.33	1.08	47.17
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	46.81	2.34	46.4
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	46.54	3.84	44.92
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	46.15	4.07	45.98
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	46.02	3.29	45.72
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	45.69	4.43	46.74
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	45.54	6.39	45.02
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	45.3	13.05	49.77
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	45.3	13.05	49.77
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	45.23	1.41	45.08
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	45.23	2.63	45.4
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	45.07	14.44	42.51
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	44.81	7.18	46.33
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	44.57	3.48	43.92
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	44.55	3.63	45.12
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	43.98	13.84	43.4
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	43.98	13.84	43.4
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	20	43.77	3.27	43.74
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	43.67	19.41	42.5
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	43.56	1.18	43.75
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	43.27	3.35	42.42
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	43.25	8.29	43.11
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	42.92	4.94	43.57
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	41.53	1.41	41.2
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	40.78	1.59	40.26
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	40.6	2.64	40.48
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	40.55	1.83	40.18
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	40.07	7.35	40.94
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	40.06	2.56	39.58
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	39.83	3.24	39.24
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	39.73	2.65	39.49
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	39.72	2.57	39.97
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	39.61	8.09	41.62
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	39.51	4.58	38.84
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	38.47	1.18	38.24
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	38.32	5.73	38.61
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	38.24	2.21	37.7
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	38.04	7.49	38.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	36.69	3.83	36.48
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	36.53	1.93	36.89
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	36.09	2.39	36.16
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	35.61	1.81	35.48
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	35.09	0.9	34.92
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	34.96	1.65	34.91
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	34.72	3.2	34.5
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	34.69	0.83	34.72
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	34.54	0.84	34.36
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	34.52	4.8	32.57
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	34.32	2.99	33.98
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	34.29	4.78	35.33
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	34.19	6.75	33.43
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	34.15	15.1	30.92
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	34.15	15.1	30.92
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	33.18	0.73	33.18
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	32.52	4.31	31.82
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	32.4	2.49	32.87
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	32.22	2.45	32.15
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	32.18	4.29	31.97
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	31.78	3.41	32.12
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	31.78	3.41	32.12
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	31.71	8.8	34.66
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	31.71	8.8	34.66
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	31.55	4.15	32.16
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	30.82	6.47	30.77
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	30.64	6.7	29.48
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	30.54	11.3	28.28
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	30.39	5.64	31.56
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	30.33	9.86	28.58
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	30.03	3.79	29.95
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	20	29.98	3.49	29.1
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	29.93	3.67	29.31
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	29.82	7.19	31.46
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	29.31	2.04	29.46
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	28.49	3.12	27.82
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	28.46	3.03	28.72
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	28.18	3.43	27.92
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	28.06	13.24	27.72
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	20	27.87	4.01	28.0
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	27.7	2.44	27.52
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	27.67	3.5	27.92
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	27.18	1.99	27.1
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	27.09	1.96	27.08
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	25.95	5.17	27.22
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	25.53	2.4	25.06
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	25.52	6.73	25.3
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	24.51	2.61	23.46
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	24.26	3.99	25.8
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	24.21	2.6	23.32
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	23.98	1.45	23.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	23.57	7.92	20.34
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	23.57	4.68	23.4
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	23.29	7.12	22.75
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	23.04	1.25	22.97
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	22.83	1.55	22.94
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	22.46	6.63	20.57
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	22.42	1.95	22.36
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	22.36	7.38	22.13
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	22.3	2.64	22.6
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	21.99	7.34	23.65
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	21.99	6.21	23.09
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	21.99	6.21	23.09
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	21.89	5.71	21.44
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	21.81	1.44	22.11
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	21.32	4.32	20.16
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	21.27	6.31	20.49
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	21.19	0.87	21.12
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	20.98	3.89	20.63
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	20.98	3.89	20.63
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	20.72	5.14	20.9
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	20.18	2.33	19.76
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	19.95	0.78	19.93
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	19.91	2.99	19.92
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	20	19.65	3.11	19.5
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	19.42	3.38	20.4
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	19.29	4.06	19.99
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	19.22	2.86	18.46
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	19.02	6.17	18.58
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	18.14	2.95	17.9
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	18.07	4.43	16.17
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	15.88	3.78	16.02
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	15.75	1.29	15.83
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	15.41	5.43	17.21
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	14.84	2.38	14.22
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	14.82	0.94	14.7
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	14.63	1.19	14.56
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	13.16	3.97	13.06
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	13.01	4.05	11.93
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	12.56	5.13	11.84
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	12.19	1.94	12.4
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	12.09	3.12	13.24
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	12.09	3.12	13.24
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	11.66	3.3	11.62
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	11.46	2.45	11.64
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	11.41	1.64	11.56
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	11.36	2.91	11.12
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	11.36	2.34	12.1
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	11.23	3.27	10.75
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	11.1	3.63	11.46
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	10.32	5.32	8.72
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	10.04	1.7	10.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	9.48	2.16	10.01
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	9.36	3.22	8.73
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	9.29	3.81	8.9
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	9.04	2.42	9.04
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	8.78	2.86	8.5
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	8.77	0.79	8.67
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	8.76	3.02	8.34
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	8.7	1.64	9.0
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	8.42	3.15	8.26
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	7.95	2.44	7.88
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	7.68	2.67	7.32
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	7.39	1.98	7.24
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	6.58	1.22	6.46
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	6.31	1.58	6.28
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	6.23	1.15	6.34
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	5.76	1.74	5.64
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	5.74	1.53	5.97
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	5.65	1.25	5.36
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	5.45	1.62	5.61
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	5.3	1.78	4.92
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	5.05	2.34	5.36
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	4.87	1.66	4.72
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	4.81	2.02	5.03
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	20	4.65	2.35	4.24
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	4.55	2.14	4.7
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	4.39	1.35	4.2
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	4.27	1.97	3.99
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	3.28	1.57	3.42
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	19	92.42	18.43	98.74
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	19	92.42	18.43	98.74
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	35.33	8.43	39.04
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	35.33	8.43	39.04
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	25.94	10.36	27.38
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	23.48	7.23	25.78
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	22.83	6.32	25.55
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	22.11	6.77	24.7
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	22.11	6.77	24.7
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	18.95	3.91	20.14
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	18.95	3.91	20.14
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	17.88	7.19	18.86
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	17.69	10.3	14.27
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	16.66	5.2	16.66
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	15.85	4.97	15.97
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	15.08	11.63	11.7
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	13.76	3.09	13.85
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	19	9.77	3.0	9.47
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	9.76	4.71	9.22
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	8.75	3.64	10.22
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	8.75	3.64	10.22
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	5.99	2.24	5.81
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	4.67	1.77	4.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	4.26	2.17	4.65
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	3.36	1.56	3.09
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	1.92	0.52	1.9
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	83.27	30.18	93.24
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	83.27	30.18	93.24
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	44.62	12.24	50.04
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	44.62	12.24	50.04
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	18	35.31	19.22	35.16
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	27.59	11.76	31.7
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	20.42	10.64	18.26
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	18.61	10.51	16.88
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	15.39	9.28	14.76
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	18	14.79	8.26	12.5
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	10.63	5.04	10.9
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	8.07	4.93	8.34
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	18	6.4	2.53	5.96
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	6.22	5.43	4.14
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	6.14	3.3	5.75
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	5.57	3.2	4.61
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	5.42	1.82	5.46
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	4.89	2.1	4.28
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	2.38	0.79	2.3
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	2.27	0.83	2.32
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	44.63	26.1	34.45
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	44.63	26.1	34.45
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	33.34	24.93	25.13
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	33.34	24.93	25.13
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	28.52	17.82	30.41
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	28.52	17.82	30.41
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	25.33	11.46	27.04
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	17	24.95	19.71	23.68
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	18.69	14.67	12.98
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	14.4	8.73	12.82
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	17	14.12	8.12	14.13
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	6.72	2.39	7.59
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	3.33	1.05	3.41
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	3.3	1.49	2.96
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	2.53	0.85	2.71
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	16.96	13.2	10.92
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	4.87	3.64	2.86
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	16	4.21	1.6	4.31
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	3.86	1.71	3.41
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	3.59	2.38	3.14
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	16	2.88	1.08	2.8
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	1.94	0.93	1.57
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	42.88	23.97	39.32
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	42.88	23.97	39.32
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	18.65	7.39	19.63
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	15.91	9.19	16.36
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	9.1	4.55	8.11
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	8.34	4.2	8.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	8.34	4.2	8.72
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	7.92	3.28	8.48
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	6.88	4.12	5.93
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	14	5.62	5.04	3.91
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	4.87	2.1	4.53
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	4.59	1.94	4.58
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	14	3.02	1.36	2.7
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	17.6	9.25	16.2
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	17.6	9.25	16.2
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	9.63	4.15	11.15
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	9.63	4.15	11.15
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	5.19	2.69	5.08
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	2.45	0.76	2.52
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	2.26	0.69	2.3
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	11.63	10.22	10.64
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	11.63	10.22	10.64
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	6.19	5.57	3.5
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	5.38	2.49	5.3
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	12	3.13	1.72	2.5
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	32.09	27.02	21.93
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	32.09	27.02	21.93
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	5.44	2.67	4.64
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	4.75	2.57	4.3
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	2.09	0.69	2.0
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	17.0	10.71	12.4
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	8.89	1.58	8.38
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	3.97	1.52	3.82
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	3.64	1.8	3.93
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	3.3	1.21	2.93
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	3.22	1.12	3.42
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	10	2.99	1.1	2.91
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	1.8	0.73	1.59
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	9	6.84	3.6	6.59
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	4.88	1.49	4.99
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	2.29	0.88	2.42
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	9	2.25	1.05	1.88
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	1.67	0.41	1.56
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	23.8	24.93	19.06
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	23.8	24.93	19.06
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	19.99	8.35	20.01
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	19.77	15.84	11.3
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	7.91	4.54	7.52
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	6.96	5.88	3.7
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	6.85	3.28	6.34
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	3.21	1.55	3.15
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	2.66	0.88	2.39
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	19.73	10.94	18.18
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	17.95	11.81	17.08
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	9.83	6.97	7.64
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	8.05	6.31	5.41
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	3.26	1.15	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

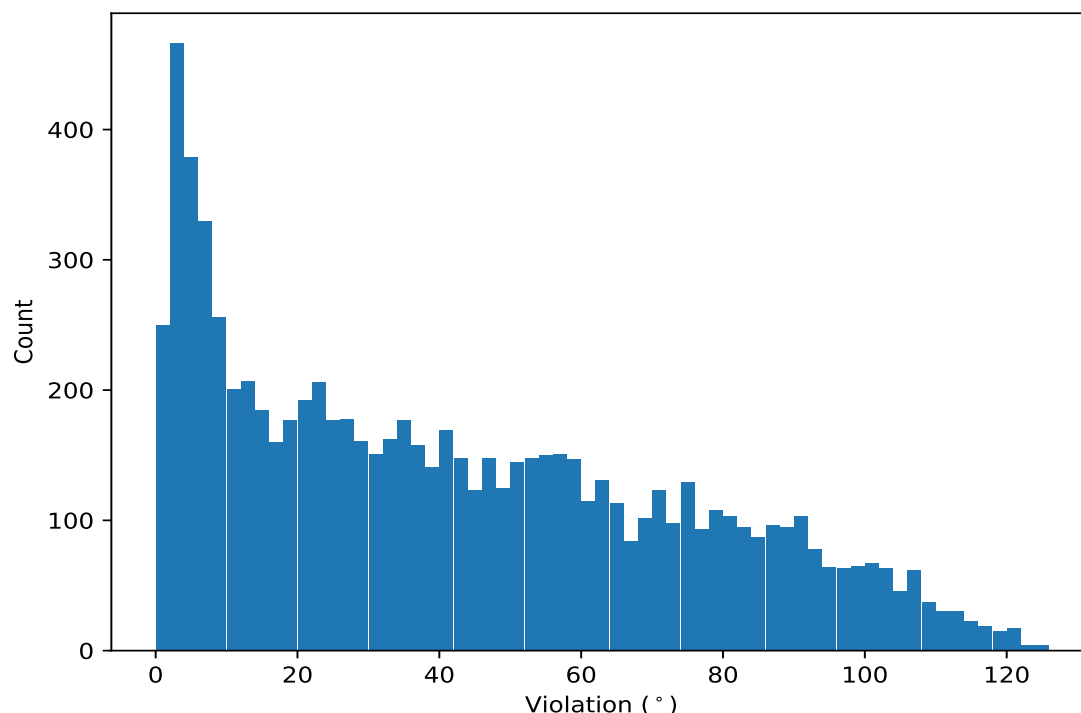
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	2.73	0.34	2.76
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	2.03	0.59	1.91
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	6.36	2.54	7.01
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	6.36	2.54	7.01
(1,228)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	5.89	2.3	5.66
(1,233)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	3.21	1.28	3.04
(2,20)	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	6	2.96	1.23	2.69
(1,99)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	2.62	0.5	2.6
(1,493)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	2.0	0.95	1.72
(1,359)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	5	4.63	2.08	5.08
(1,323)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	3.1	1.98	2.0
(1,163)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	2.31	0.61	2.34
(2,56)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:CA	1:687:A:GLN:C	1:688:A:ARG:N	5	1.29	0.11	1.3
(1,543)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	4	21.11	11.76	18.7
(1,521)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	3.54	1.5	3.18
(1,539)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	2.54	0.89	2.55
(1,26)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	1.8	0.76	1.45
(1,178)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	1.75	1.16	1.12
(1,514)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	1.62	0.32	1.78
(2,14)	1:638:A:LEU:N	1:638:A:LEU:CA	1:638:A:LEU:C	1:639:A:HIS:N	4	1.46	0.36	1.48
(2,2)	1:629:A:ASP:N	1:629:A:ASP:CA	1:629:A:ASP:C	1:630:A:ARG:N	4	1.4	0.37	1.28
(1,405)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	21.26	14.88	24.28
(1,405)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	21.26	14.88	24.28
(1,218)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	18.98	10.0	24.12
(1,475)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	8.54	4.55	10.18
(1,371)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	8.32	4.08	11.08
(1,334)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	6.54	6.2	3.22
(1,431)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	6.28	1.85	6.76
(1,279)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	5.38	1.7	6.32
(1,437)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	5.23	2.0	4.39
(1,520)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	3.34	0.78	2.85
(1,98)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	1.8	0.83	1.45
(1,209)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	1.24	0.12	1.26
(1,468)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	7.1	1.34	7.1
(1,441)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	2	5.64	3.16	5.64
(1,312)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	5.46	1.05	5.46
(1,213)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	5.26	3.05	5.26
(1,555)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	2	3.67	0.7	3.67
(1,556)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	3.18	1.8	3.18
(2,6)	1:634:A:TRP:N	1:634:A:TRP:CA	1:634:A:TRP:C	1:635:A:LEU:N	2	2.32	0.1	2.32
(1,558)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	2.22	0.68	2.22
(2,51)	1:681:A:GLY:C	1:682:A:LEU:N	1:682:A:LEU:CA	1:682:A:LEU:C	2	1.78	0.31	1.78
(1,321)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	2	1.7	0.45	1.7
(1,146)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	1.44	0.43	1.44

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

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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	125.66
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	125.54
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	125.2
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	124.97
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	123.61
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	123.41
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	123.12
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	122.11
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	121.91
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	121.83
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	121.82
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	121.63
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	121.62
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	121.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	4	121.36
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	10	121.27
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	121.06
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	121.03
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	120.96
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	120.57
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	120.32
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	17	120.19
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	120.13
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	120.05
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	120.04
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	119.85
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	119.67
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	119.53
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	119.35
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	119.34
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	119.28
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	3	119.08
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	118.85
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	118.67
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	118.62
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	118.37
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	118.26
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	118.13
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	118.06
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	118.04
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	117.98
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	12	117.83
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	117.74
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	7	117.74
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	19	117.68
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	117.39
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	117.37
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	117.23
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	117.2
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	117.17
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	16	117.05
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	117.0
(1,157)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	116.77
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	116.44
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	116.33
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	116.23
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	116.21
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	116.15
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	17	116.12
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	115.92
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	115.92
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	10	115.85
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	115.84
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	115.56
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	15	115.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	8	115.19
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	18	114.94
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	114.81
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	114.75
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	114.74
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1	114.74
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	114.66
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	114.51
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	8	114.32
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	19	114.17
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	7	114.13
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	4	114.11
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	16	114.08
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	8	114.06
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	12	114.04
(1,169)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	114.0
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	114.0
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	113.95
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	113.94
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	113.82
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1	113.77
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	17	113.76
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	113.75
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	113.58
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	113.56
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	12	113.28
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	11	113.27
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	15	113.24
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	113.23
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	20	113.07
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	7	113.01
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1	112.9
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	16	112.69
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	112.66
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	14	112.61
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	15	112.5
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	8	112.47
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	18	112.47
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	112.46
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	112.44
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	112.3
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	112.28
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	6	112.25
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	112.1
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	112.08
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	112.05
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	112.01
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	111.97
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	3	111.89
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	111.75
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	111.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	111.52
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	111.47
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	111.38
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	2	111.38
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	111.33
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	16	111.31
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	111.07
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	111.05
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	111.05
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	111.01
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	5	110.96
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	110.95
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	10	110.88
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	110.75
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	110.68
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	110.64
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	110.58
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	110.58
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	2	110.52
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	18	110.49
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	110.44
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	2	110.44
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	110.29
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	14	110.14
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	110.08
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	19	110.06
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	13	109.91
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	109.91
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	109.85
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	4	109.81
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	9	109.78
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	109.76
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	109.71
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	5	109.68
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	11	109.67
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	109.51
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	109.44
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	109.38
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	109.29
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	109.2
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	109.18
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	109.14
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	2	109.07
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	109.02
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	12	108.99
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	16	108.97
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	108.89
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	18	108.83
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	6	108.8
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	108.76
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	108.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	108.67
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	9	108.6
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	6	108.58
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	11	108.5
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	108.43
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	5	108.36
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1	108.33
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	2	108.25
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	108.19
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	9	108.16
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	108.15
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	19	108.11
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	107.91
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	107.74
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	107.72
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	107.69
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	107.64
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	107.63
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	107.61
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	9	107.58
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	15	107.56
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	107.56
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	107.52
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	107.51
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	9	107.5
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	18	107.5
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	8	107.49
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	107.48
(1,144)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	107.48
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	107.46
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	9	107.46
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	13	107.37
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	107.32
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	107.25
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	11	107.17
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	107.16
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	107.16
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	3	107.15
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	6	107.09
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	107.0
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	5	106.89
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	106.86
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	3	106.86
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	11	106.86
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	6	106.82
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	106.79
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	106.79
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	106.76
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	16	106.7
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	16	106.66
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	10	106.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	106.65
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	106.64
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	106.57
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	5	106.57
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	7	106.53
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	106.5
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	106.49
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	106.49
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	106.47
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	106.45
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	7	106.38
(1,168)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	106.37
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	106.35
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	14	106.34
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	106.3
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	106.28
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	17	106.2
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	106.18
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	106.17
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	106.13
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	3	106.12
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	106.08
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	106.07
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	105.99
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	13	105.93
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	105.77
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	105.77
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	105.72
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	8	105.67
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	4	105.65
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	19	105.65
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	105.43
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	105.37
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	13	105.32
(1,137)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	14	105.23
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	105.17
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	105.05
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	105.01
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	105.01
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	15	105.0
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	10	104.94
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	104.89
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	17	104.86
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	12	104.84
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	104.83
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	104.82
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1	104.77
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	104.7
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	104.6
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	104.6
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	104.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	3	104.53
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	104.42
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	104.38
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	104.38
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	104.37
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	104.34
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	14	104.33
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	104.29
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	104.25
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	104.25
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	104.23
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	10	104.22
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	104.16
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	104.15
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	18	104.1
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	19	104.09
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	15	104.08
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	104.02
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	4	103.91
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	7	103.89
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	103.89
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	103.88
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	103.88
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	7	103.83
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	103.74
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	13	103.62
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	103.58
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	103.52
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	15	103.5
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	103.49
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	103.49
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	103.47
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	103.46
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	103.43
(1,113)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	5	103.43
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	103.38
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	7	103.36
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	103.33
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	103.27
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	6	103.25
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	103.15
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	103.14
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	103.09
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	103.07
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	103.06
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	103.06
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	103.04
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	103.03
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	10	103.0
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	4	103.0
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	102.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	102.93
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	102.92
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	102.91
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	102.88
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	102.87
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	102.85
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	102.82
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	11	102.81
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	12	102.7
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	102.7
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	8	102.69
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	102.69
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	102.68
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	16	102.5
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	102.5
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	102.47
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	102.44
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	102.37
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1	102.36
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	18	102.34
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	102.29
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	102.29
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	4	102.28
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	102.28
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	7	102.26
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	102.25
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	12	102.21
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	102.19
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	14	102.05
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1	102.02
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	2	101.98
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	101.96
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	12	101.92
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	101.91
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	101.91
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	101.83
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	19	101.77
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	101.71
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	101.69
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	101.63
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	101.6
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	101.51
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	101.47
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	101.46
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	101.38
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	101.37
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	19	101.37
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	101.34
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	101.33
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	17	101.29
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	101.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	9	101.19
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1	101.14
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	101.13
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	101.12
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	2	101.12
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	101.07
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	101.07
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	101.02
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	101.01
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	17	101.01
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	3	101.01
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	14	101.01
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	13	100.98
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	100.98
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	100.96
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	100.92
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	12	100.91
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	100.8
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	100.75
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	100.75
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	100.71
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	100.69
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	100.67
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	100.65
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	4	100.63
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	100.54
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	100.54
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	100.53
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	100.53
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	100.5
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	5	100.47
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	5	100.47
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	100.46
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	14	100.37
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	100.36
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	100.34
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	100.34
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	100.34
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	100.34
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	5	100.29
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	100.28
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	100.27
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	100.24
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	100.21
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	3	100.19
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	16	100.13
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	99.9
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	13	99.88
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	99.86
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	99.84
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	5	99.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	99.75
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	99.74
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1	99.69
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	99.6
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	99.55
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	18	99.52
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	99.52
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	12	99.5
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	8	99.46
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	99.43
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	99.43
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	99.4
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	99.39
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	99.39
(1,124)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	13	99.24
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	99.21
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	7	99.18
(1,155)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	10	99.16
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	17	99.13
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	11	99.04
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	98.99
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	6	98.96
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1	98.94
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	16	98.93
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	20	98.91
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	98.89
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	98.89
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	98.77
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	98.75
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	2	98.74
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	12	98.72
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	98.7
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	98.63
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	4	98.6
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	98.6
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	3	98.57
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	98.53
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	98.48
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	98.45
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	98.41
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	98.39
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	98.38
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	9	98.35
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	12	98.3
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	17	98.27
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	98.26
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	98.25
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	19	98.23
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	14	98.21
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	98.2
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	98.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	10	98.17
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	98.13
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	98.12
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	98.08
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	98.04
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	2	98.04
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	6	98.04
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	98.02
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	18	98.01
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	97.99
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	97.98
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	15	97.96
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	97.93
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	97.92
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	2	97.86
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	97.84
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	97.78
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	18	97.77
(1,182)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	97.75
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	97.73
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	97.69
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	97.59
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	8	97.56
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	97.52
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	97.48
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	97.48
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	6	97.48
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	97.4
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	97.4
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	14	97.38
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	97.36
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	97.27
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	97.25
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	97.24
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	97.24
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	97.18
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	97.17
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	97.14
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	97.14
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	19	97.13
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	15	97.09
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	15	97.05
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	11	96.99
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	96.93
(1,160)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	20	96.93
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	96.89
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	96.85
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	96.79
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	7	96.79
(1,295)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	11	96.75
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	96.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	96.68
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	96.67
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	96.67
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	13	96.61
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	13	96.61
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	96.6
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	8	96.53
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	96.5
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	96.48
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	96.47
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	96.47
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	96.46
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	96.38
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	16	96.32
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	96.29
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	96.19
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	96.18
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	96.16
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	96.13
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	96.1
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	96.01
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	10	95.96
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	5	95.95
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	8	95.93
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	95.92
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	95.91
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	13	95.9
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	6	95.84
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	15	95.79
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	95.79
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	95.78
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	95.76
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	95.72
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	95.7
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	17	95.68
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	95.65
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	95.58
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	12	95.56
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	17	95.54
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	2	95.51
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	95.47
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	95.43
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	15	95.4
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	95.39
(1,296)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	95.37
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	95.36
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	95.23
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	15	95.21
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	95.2
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	95.12
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	94.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	94.98
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	94.97
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	18	94.95
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1	94.95
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	9	94.93
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	94.86
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	94.81
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	94.78
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	20	94.73
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	94.73
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	94.73
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	11	94.71
(1,476)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	94.7
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1	94.66
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	94.65
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	94.61
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	94.6
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	94.53
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	94.48
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	11	94.45
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	94.45
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	94.42
(1,190)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	11	94.36
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	94.35
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	94.32
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	94.31
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	16	94.28
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	94.28
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	18	94.26
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	94.22
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	94.16
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	3	94.15
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	94.1
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	2	94.09
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	93.92
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	10	93.87
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	93.87
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	4	93.86
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	93.85
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	93.83
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	93.82
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	93.8
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	93.79
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	93.77
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	14	93.76
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	93.76
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	19	93.75
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	93.73
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	93.72
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	93.7
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	19	93.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	93.62
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	93.61
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	93.58
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	93.53
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	93.51
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	93.47
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	93.46
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	93.45
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	18	93.42
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	8	93.35
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	93.3
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	93.27
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	93.27
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	93.26
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	93.25
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	11	93.17
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	5	93.15
(1,195)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	93.12
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	93.12
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	93.11
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	93.08
(1,109)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	93.06
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	92.99
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	92.97
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	92.94
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	92.93
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	92.92
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	92.89
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	2	92.82
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	7	92.81
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	11	92.79
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	92.75
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	16	92.73
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	92.73
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	92.72
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	92.72
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	8	92.66
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	92.66
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	92.66
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	92.63
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	92.63
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	92.57
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	9	92.56
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	5	92.55
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	92.54
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	92.52
(1,352)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	92.47
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	92.41
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	92.36
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	19	92.36
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	19	92.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	92.27
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	18	92.27
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	92.25
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	92.24
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	92.19
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	92.17
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	92.14
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	2	92.12
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	92.1
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	92.09
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	91.99
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	14	91.94
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	91.94
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	91.9
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	91.89
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	91.88
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	91.88
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	91.85
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	91.84
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	91.84
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	6	91.79
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	91.77
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	91.77
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	91.76
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	91.73
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	15	91.68
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	91.64
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	91.54
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	91.52
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	91.52
(1,196)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	17	91.45
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	91.42
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	91.39
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	3	91.39
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	91.36
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	91.35
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	91.32
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	91.3
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	18	91.26
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	91.26
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	14	91.25
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	91.24
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	91.21
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	8	91.18
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	13	91.15
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	91.13
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	91.06
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	91.03
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	91.02
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	91.01
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	6	90.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	90.97
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	90.97
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	90.96
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	90.95
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	19	90.92
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	90.84
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	13	90.83
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	90.81
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	90.79
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	90.77
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	6	90.76
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	90.74
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	90.73
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	11	90.72
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	90.68
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	90.66
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	90.65
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	90.64
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	20	90.63
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	9	90.61
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	5	90.6
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	90.6
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	17	90.58
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	90.57
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	20	90.53
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	90.52
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	90.52
(1,110)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	90.52
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	90.5
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	90.49
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	90.48
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	90.46
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	90.45
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	90.43
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	90.42
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	3	90.41
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	90.41
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	90.4
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	90.4
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	9	90.39
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	90.39
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	90.37
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	90.37
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	90.37
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	90.35
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	90.34
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	90.33
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	11	90.32
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	90.3
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	90.3
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	3	90.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	90.24
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	9	90.22
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	16	90.22
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	90.17
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	90.14
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	90.11
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	90.08
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	90.08
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1	90.07
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	90.04
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	90.0
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	7	89.97
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	89.96
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	89.94
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	15	89.93
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	89.9
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	89.89
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	12	89.87
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	89.87
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	89.86
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	89.77
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	89.75
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	19	89.72
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	9	89.7
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	89.69
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	89.67
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	89.67
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	89.67
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	89.66
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	89.65
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	3	89.63
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	89.59
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	89.59
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	3	89.57
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	89.54
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	15	89.51
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	89.49
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	89.49
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	89.46
(1,143)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	89.41
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	89.41
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	4	89.39
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	89.37
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	89.33
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	89.32
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	89.28
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	10	89.28
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	89.25
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	89.23
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	89.19
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	89.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	17	89.16
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	4	89.15
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	89.11
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	89.09
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	89.05
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	89.04
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	89.03
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	89.02
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	89.02
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	89.02
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	88.93
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	88.91
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	88.89
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	88.8
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	88.78
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	2	88.73
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	88.7
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	88.67
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	88.6
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	88.57
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	88.57
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	5	88.56
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	88.56
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	88.55
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	88.54
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	88.54
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	88.51
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	88.48
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	88.48
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	88.45
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	9	88.44
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	16	88.44
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	88.44
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	88.42
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	88.42
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	88.39
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	9	88.38
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	88.36
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	88.35
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	88.32
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	13	88.29
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	88.27
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	88.22
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	88.21
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	88.19
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	88.17
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	88.14
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	13	88.13
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	88.09
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	88.09
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	88.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	88.06
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	88.06
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	88.05
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	2	88.01
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	87.99
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	87.97
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	87.93
(1,115)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	87.91
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	9	87.89
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	87.89
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	87.89
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	87.86
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	87.86
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	87.84
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	87.82
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	87.78
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	6	87.76
(1,480)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	10	87.74
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	87.73
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	87.72
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	87.71
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	87.71
(1,167)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	20	87.63
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	87.62
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	87.62
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	87.54
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	87.51
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	87.51
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	87.51
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	87.48
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	87.46
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	87.45
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	87.44
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	10	87.44
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	87.44
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	4	87.43
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	87.32
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	87.31
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	87.28
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	87.22
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	87.21
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	87.19
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	87.16
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	87.14
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	87.13
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	87.12
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	87.1
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	87.08
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	87.08
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	87.07
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	87.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	87.03
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	86.99
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	86.98
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	86.98
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	86.96
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	86.93
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	86.9
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	86.89
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	86.85
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	86.84
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	86.79
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	86.76
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	86.76
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	86.75
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	86.75
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	86.68
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	86.66
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	86.65
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	86.63
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	86.62
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	86.6
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	86.58
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	86.53
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	86.48
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	86.45
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	86.45
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	86.44
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	86.44
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	86.44
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	86.43
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	86.42
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	86.42
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	86.4
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	86.39
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	86.39
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	86.35
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	86.35
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	86.31
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	86.23
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	86.13
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	86.12
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	86.06
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	86.05
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	86.04
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	86.04
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	86.03
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	86.03
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	86.01
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	86.0
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	11	85.95
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	85.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	85.94
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	85.92
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	85.92
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	85.89
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	85.89
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	85.87
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	85.86
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	85.85
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	85.82
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	85.82
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	85.77
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	85.72
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	85.65
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	85.64
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	85.61
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	85.61
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	85.6
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	85.59
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	85.58
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	85.56
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	85.55
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	85.51
(1,293)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	85.49
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	85.47
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	85.47
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	85.43
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	85.38
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	85.38
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	85.34
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	85.33
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	85.32
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	85.31
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	85.29
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	85.29
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	85.28
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	85.26
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	85.23
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	85.21
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	85.21
(1,203)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	12	85.2
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	85.19
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	85.18
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	85.17
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	85.15
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	85.12
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	85.11
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	85.06
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	84.9
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	84.89
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	84.87
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	84.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	5	84.77
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	84.75
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	6	84.73
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	84.7
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	84.69
(1,68)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	84.65
(1,328)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	84.64
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	84.62
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	84.59
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	84.58
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	84.49
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	84.47
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	84.4
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	84.4
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	84.39
(1,442)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	84.37
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	84.3
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	84.29
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	84.29
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	84.26
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	84.24
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	84.24
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	84.23
(1,262)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	84.22
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	84.22
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	84.2
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	84.19
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	84.12
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	84.09
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	84.03
(1,204)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	84.02
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	84.01
(1,119)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	18	84.0
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	84.0
(1,156)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	83.96
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	83.95
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	83.87
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	83.84
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	83.83
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	83.79
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	83.79
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	83.73
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	83.73
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	83.71
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	83.7
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	83.69
(1,56)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	83.69
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	83.67
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	83.65
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	83.65
(1,92)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	83.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	83.49
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	83.49
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	83.46
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	83.45
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	83.43
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	83.41
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	83.39
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	83.38
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	83.38
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	83.36
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	83.3
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	83.28
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	83.26
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	83.19
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	83.19
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	83.19
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	83.18
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	83.17
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	83.16
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	83.16
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	83.11
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	83.08
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	83.08
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	83.07
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	83.06
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	83.04
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	15	83.0
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	82.98
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	82.97
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	82.89
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	82.87
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	82.84
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	82.82
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	82.78
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	82.77
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	82.74
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	82.73
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	82.69
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	82.69
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	82.65
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	6	82.65
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	82.6
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	82.59
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	82.59
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	82.58
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	82.56
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	82.56
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	82.52
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	82.51
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	82.48
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	82.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	82.47
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	82.47
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	82.45
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	82.45
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	82.45
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	82.44
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	82.44
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	82.41
(1,201)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	82.4
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	82.37
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	82.34
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	82.33
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	8	82.33
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	82.32
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	82.32
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	82.31
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	82.25
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	17	82.22
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	82.19
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	82.19
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	82.13
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	82.12
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	82.11
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	82.1
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	82.08
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	82.04
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	82.0
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	81.94
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	81.92
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	81.91
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	81.84
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	81.83
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	81.8
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	81.8
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	81.8
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	81.77
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	81.76
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	81.75
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	81.67
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	81.67
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	81.66
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	81.65
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	81.61
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	81.6
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	81.55
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	81.55
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	81.54
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	81.52
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	81.52
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	81.52
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	81.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	81.48
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	81.48
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	81.47
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	81.46
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	81.43
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	81.42
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	81.4
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	81.39
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	81.38
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	81.37
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	81.36
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	81.33
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	81.31
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	81.31
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	81.31
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	7	81.29
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	81.28
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	81.25
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	81.24
(1,376)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	4	81.21
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	81.21
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	81.16
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	81.13
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	81.12
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	81.11
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	81.1
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	81.1
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	81.05
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	81.05
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	81.04
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	80.96
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	80.93
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	80.92
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	80.92
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	80.92
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	80.9
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	80.87
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	80.86
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	80.85
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1	80.84
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	80.82
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	80.81
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	80.8
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	80.76
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	80.7
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	80.7
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	80.63
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	80.58
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	80.57
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	80.57
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	80.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	80.51
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	80.45
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	80.45
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	80.39
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	80.39
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	80.38
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	80.38
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	80.33
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	80.31
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	80.3
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	80.29
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	80.27
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	80.26
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	80.22
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	80.22
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1	80.21
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	80.16
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	80.14
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	80.13
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	80.08
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	18	80.08
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	80.07
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	80.07
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	80.04
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	80.02
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	80.01
(1,62)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	80.01
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	80.0
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	79.99
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	79.96
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	79.95
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	79.91
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	79.89
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	79.88
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	79.88
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	79.84
(1,194)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	79.84
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	79.84
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	79.82
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	79.81
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	79.8
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	79.79
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	79.77
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	13	79.77
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	8	79.76
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	79.74
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	79.74
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	11	79.71
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	79.71
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	79.69
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	11	79.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	79.68
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	79.68
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	79.66
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	79.65
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	79.65
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	79.62
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	79.6
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	10	79.55
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	79.53
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	79.53
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	79.5
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	16	79.43
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	79.43
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	79.42
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	79.39
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	79.35
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	79.35
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	79.29
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	79.28
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	79.23
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	79.23
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	79.19
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	14	79.18
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	79.17
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	79.16
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	79.16
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	15	79.13
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	79.1
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	10	79.1
(1,200)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	79.05
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	79.03
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	79.02
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	79.01
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	5	78.97
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	8	78.97
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	78.96
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	8	78.94
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	14	78.93
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	16	78.91
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	78.91
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	78.87
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	78.82
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	78.76
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	78.73
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	78.73
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	14	78.72
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	78.71
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	78.7
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	78.7
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	78.66
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	78.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	78.56
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	78.54
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	78.53
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	78.53
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	78.44
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	78.41
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	78.41
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	78.38
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	12	78.36
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	78.35
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	78.35
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	78.33
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	78.33
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	78.29
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	4	78.25
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	78.24
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	78.24
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	78.21
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	78.2
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	78.18
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	78.18
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	78.17
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1	78.16
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	9	78.12
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	78.11
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	78.11
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	4	78.09
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	78.08
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	3	78.06
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	78.05
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	78.03
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	78.02
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	78.01
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	14	78.0
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	77.99
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	77.99
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1	77.99
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	77.99
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	77.99
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	5	77.89
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	77.87
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	77.85
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	77.84
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	77.79
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	77.74
(1,79)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	77.72
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	19	77.71
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	77.7
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	77.66
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	77.64
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	6	77.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	77.64
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	77.63
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	77.62
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	77.59
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	77.57
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	77.55
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	77.53
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	77.49
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	77.49
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	77.48
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	77.46
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	77.44
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	77.43
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	77.41
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	77.36
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	77.35
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	77.35
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	77.29
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	77.26
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	77.22
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	4	77.21
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	77.21
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	77.19
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	77.18
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	77.17
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	77.13
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	77.11
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	77.1
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	77.07
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	77.02
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	77.0
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	77.0
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	76.99
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	76.98
(1,243)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	76.98
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	10	76.98
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	76.98
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	76.86
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	13	76.84
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	76.81
(1,165)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	76.81
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	76.76
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	76.74
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	76.7
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	76.67
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	9	76.65
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	76.65
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	76.64
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	76.59
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	76.58
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	76.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	76.55
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	76.54
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	76.53
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	76.49
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	76.43
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	76.41
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	76.4
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	76.4
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	76.4
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	76.36
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	4	76.36
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	76.26
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	76.26
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	7	76.25
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	76.22
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	3	76.22
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	76.21
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	76.19
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	20	76.18
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	76.17
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	76.17
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	76.17
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	76.11
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	19	76.08
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	6	76.05
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	75.99
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	75.98
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	75.91
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	75.91
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	75.9
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	75.86
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	17	75.84
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	75.8
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	75.77
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	7	75.74
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	75.73
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	75.71
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	75.71
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	7	75.69
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	75.68
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	17	75.68
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	75.67
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	75.66
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	11	75.63
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	75.62
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	75.62
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	75.61
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	75.61
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	75.59
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	75.57
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	75.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	75.54
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	75.54
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	75.53
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	75.52
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	75.5
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	75.48
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	75.47
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	75.47
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	75.47
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	75.47
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	75.46
(1,205)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	75.44
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	75.43
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	75.42
(1,400)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	75.4
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	75.36
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	12	75.36
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	75.33
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	75.32
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	75.31
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	7	75.31
(1,135)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	75.3
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	75.29
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	75.29
(1,75)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	75.27
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	75.25
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	75.24
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	14	75.2
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	75.2
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	75.18
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	15	75.18
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	75.16
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	75.14
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	15	75.13
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	75.13
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	75.11
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	6	75.1
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	17	75.09
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	75.09
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	75.09
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	75.08
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	75.06
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	75.06
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	75.04
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	75.03
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	75.02
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	18	75.01
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	15	74.99
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	74.98
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	74.96
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	74.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	74.94
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	74.94
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	74.9
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	74.9
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	74.89
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	74.88
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	74.87
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	74.84
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	74.8
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	74.79
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	74.78
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	74.76
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	74.73
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	74.72
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	74.7
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	74.69
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	74.69
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	74.68
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	74.68
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	74.62
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	74.62
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	74.58
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	74.56
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	74.56
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	74.55
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	74.54
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	74.49
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	74.43
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	13	74.41
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	74.4
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	74.38
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	74.36
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	74.34
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	74.33
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	74.3
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	74.27
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	74.27
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	74.26
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	74.24
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	74.24
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	74.23
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	74.22
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	19	74.22
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	74.19
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	74.17
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	74.11
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	74.1
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	74.1
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	74.1
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	74.09
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	2	74.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	74.01
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	73.99
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	73.99
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	73.98
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	18	73.98
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	73.96
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	73.92
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	73.9
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	73.85
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	73.81
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	73.81
(1,78)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	73.81
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	17	73.79
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	73.79
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	73.77
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	73.74
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	73.73
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	19	73.72
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	73.71
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	73.69
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	73.67
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	73.66
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	12	73.62
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	73.61
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	73.6
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	73.59
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	73.57
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	9	73.55
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	73.51
(1,138)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	2	73.49
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	73.49
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	73.48
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	73.48
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	73.48
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	7	73.47
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	73.47
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	73.47
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	73.47
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	73.44
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	2	73.43
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	73.42
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	73.42
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	73.37
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	73.33
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	73.33
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	73.3
(1,95)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	73.28
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	73.24
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	73.24
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	73.22
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	73.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	73.22
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	73.2
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	73.19
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	73.17
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	73.14
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	73.13
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	73.12
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	11	73.11
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	73.09
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	73.08
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	73.05
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	73.05
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	73.0
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	72.98
(1,150)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	72.97
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	72.95
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	72.94
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	13	72.88
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	15	72.87
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	72.85
(1,51)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	72.83
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	72.82
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1	72.76
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	72.75
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	72.71
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	6	72.66
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	72.65
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	72.64
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	72.64
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	72.63
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	14	72.58
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	72.51
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	19	72.48
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	72.47
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	72.47
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	72.47
(1,164)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	72.45
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	72.44
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	72.43
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	72.42
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	14	72.29
(1,104)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	72.27
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	72.23
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	72.22
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	14	72.14
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	72.14
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	72.13
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	72.01
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	71.92
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	71.92
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	71.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	71.86
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	71.75
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	71.75
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	71.74
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	71.74
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	71.73
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	71.7
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	71.69
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	71.69
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	71.69
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	71.62
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	71.62
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	71.61
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	71.6
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	71.59
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	71.58
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	71.57
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	71.57
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	71.53
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	71.52
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	71.51
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	16	71.51
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	71.5
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	5	71.48
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	6	71.45
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	71.45
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	71.44
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	71.42
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	15	71.41
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	6	71.41
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	71.38
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	71.38
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	71.36
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	71.35
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	71.34
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	71.34
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	71.34
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	71.33
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	71.33
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	71.31
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	71.29
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	71.28
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	71.26
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	71.24
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	71.18
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	71.17
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	10	71.14
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	71.13
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	71.11
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	71.11
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	71.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	71.03
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	71.02
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	71.01
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	71.0
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	70.97
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	70.97
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	70.96
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	70.94
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	13	70.94
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	70.93
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	70.93
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	70.91
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	70.89
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	70.89
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	70.87
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	70.84
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	70.84
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	70.81
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	70.8
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	70.8
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	70.76
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	2	70.73
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	70.72
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	70.72
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	70.7
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	10	70.68
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	15	70.67
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	70.63
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	70.63
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	70.62
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	70.61
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	70.6
(1,139)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	70.59
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	12	70.55
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	70.52
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	70.5
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	70.48
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	16	70.46
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	70.46
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1	70.45
(1,266)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	70.45
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	70.45
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	70.43
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	70.43
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	70.42
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	70.42
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	70.42
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	70.38
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	70.38
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	70.37
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	70.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	70.25
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	70.2
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	70.19
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	70.16
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	70.16
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	70.14
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	70.13
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	70.13
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	70.12
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	70.12
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	70.12
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	4	70.11
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	70.1
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	70.04
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	9	70.04
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	70.03
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	18	70.01
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	2	70.0
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	69.99
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	69.99
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	69.98
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	69.97
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	12	69.96
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	69.95
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	69.9
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	69.89
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	69.88
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	69.85
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	69.85
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	69.83
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	3	69.79
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	69.75
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	69.74
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	69.73
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	6	69.73
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	69.7
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	69.68
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	69.67
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	69.67
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1	69.65
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	69.65
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	69.62
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	69.62
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	69.6
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	69.57
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	69.55
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	69.54
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	69.53
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	69.5
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	69.47
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	69.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	69.45
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	69.36
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	69.33
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	69.3
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	69.27
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	69.25
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	69.25
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	4	69.23
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	69.23
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	69.22
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	69.22
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	69.21
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	10	69.2
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	69.2
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	69.18
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	13	69.15
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	69.05
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	7	69.04
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	69.03
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	68.99
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	17	68.95
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	68.94
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	68.91
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	68.9
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	68.88
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	68.87
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	68.87
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	68.87
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	18	68.86
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	68.86
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	68.84
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	11	68.82
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	68.77
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	68.73
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	2	68.69
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	68.68
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	68.68
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	8	68.67
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	68.64
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	4	68.62
(1,257)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	68.6
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	8	68.57
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	19	68.56
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	68.55
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	68.54
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	68.52
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	68.52
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	68.52
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	17	68.47
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	68.41
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	68.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	68.38
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	68.34
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	68.28
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	68.22
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	9	68.22
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	68.21
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	68.21
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	68.19
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	68.13
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	68.06
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	68.05
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	68.05
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	68.04
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	68.04
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	68.03
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	68.02
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	68.02
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	68.02
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	67.91
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	67.91
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	67.91
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	67.9
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	67.86
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	67.85
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	19	67.84
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	67.83
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	67.8
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	67.78
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	67.74
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	67.71
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	67.7
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	67.69
(1,108)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	67.67
(1,121)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	67.64
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	17	67.61
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	12	67.61
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	67.58
(1,344)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	67.57
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	16	67.55
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	67.55
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	67.53
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	67.45
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	9	67.44
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	2	67.43
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	67.43
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	67.43
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	67.43
(1,316)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	67.41
(1,145)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	67.37
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	67.36
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	67.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	67.28
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	67.26
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	67.25
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	67.21
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	67.21
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	14	67.2
(1,330)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	67.2
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	67.14
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	67.1
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	67.09
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	67.08
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	67.06
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	67.06
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	67.01
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1	67.01
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	66.97
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	66.95
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	66.93
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	66.92
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	8	66.9
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	66.87
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	66.85
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	66.81
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	66.8
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	66.73
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	66.72
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	8	66.69
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	66.65
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	66.63
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	66.55
(1,434)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	3	66.49
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	66.47
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	66.44
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	66.4
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	66.3
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	66.25
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	66.25
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	66.23
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	2	66.22
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	66.18
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	66.16
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	9	66.13
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	66.11
(1,481)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	66.1
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	66.08
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	66.05
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	66.03
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	66.02
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	3	66.01
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	66.0
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	66.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	65.99
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	3	65.98
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	65.97
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	65.96
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	65.95
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	65.94
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	65.94
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	65.91
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	65.89
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	16	65.87
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	65.86
(1,91)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	65.84
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	65.83
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	65.82
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	65.8
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	65.78
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	65.76
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	65.75
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	6	65.74
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	65.73
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	65.72
(1,254)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	65.72
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	12	65.66
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	65.66
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	5	65.66
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	65.66
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	65.66
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	65.62
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	10	65.61
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	65.58
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	65.58
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	65.57
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	65.55
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	65.48
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	65.45
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	65.45
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	65.45
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	65.42
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	65.41
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	65.39
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	65.38
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	65.36
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	65.35
(1,341)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	65.29
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	65.28
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	3	65.28
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	2	65.21
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	65.19
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	11	65.16
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	65.14
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	65.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	65.09
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	65.09
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	65.09
(1,281)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	18	65.06
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	7	65.06
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	65.05
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	65.0
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	11	64.99
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	64.96
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	64.95
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	64.93
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	17	64.89
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	64.86
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	64.85
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	64.84
(1,549)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	5	64.82
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	64.81
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	64.8
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	64.79
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	64.77
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	9	64.72
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	64.71
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	64.65
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	64.64
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	64.6
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	6	64.6
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	64.55
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	64.54
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	14	64.47
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	64.45
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	64.44
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	64.4
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	64.4
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	64.37
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	64.36
(1,524)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	64.35
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	64.34
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	64.32
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	64.31
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	64.31
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	64.31
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	64.3
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	64.25
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	64.22
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	8	64.22
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	64.22
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	64.21
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	64.19
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	64.15
(1,93)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	64.15
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	64.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	64.11
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	64.07
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	64.07
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	16	64.05
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	64.04
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	64.04
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	64.03
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	64.02
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	64.02
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	64.01
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	64.01
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	63.98
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	63.95
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	63.94
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	63.94
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	16	63.93
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	18	63.93
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	63.92
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	18	63.9
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	63.9
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	63.86
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	63.85
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	63.84
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	63.83
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	63.82
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	63.81
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	63.8
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	63.79
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	63.76
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	63.76
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	63.76
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	63.73
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	63.71
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	63.68
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	63.67
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	63.67
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	63.67
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	63.66
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	15	63.66
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	15	63.65
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	63.64
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	63.64
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	6	63.63
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	63.62
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	11	63.62
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	13	63.61
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	63.55
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	63.55
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	63.53
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	63.52
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	63.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	10	63.5
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	63.47
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	63.45
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	63.45
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	63.44
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	63.44
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	63.42
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	63.41
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	63.41
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	63.38
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	19	63.38
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	63.36
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	63.33
(1,222)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	63.32
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	63.31
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	63.22
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	63.22
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	63.2
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	63.19
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	5	63.19
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	63.15
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	63.13
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	63.12
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	63.11
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	63.11
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	63.09
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	7	63.06
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	11	63.02
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	63.02
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	63.01
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	63.01
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	7	63.0
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	62.99
(1,246)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	62.98
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	62.96
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	62.95
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	19	62.95
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	62.94
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	62.91
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	10	62.91
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	62.88
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	62.87
(1,67)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	62.87
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	62.85
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	5	62.85
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	62.84
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	12	62.84
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	62.83
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	19	62.82
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	62.81
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	62.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,278)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	5	62.78
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	62.78
(1,297)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	62.77
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	62.76
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	62.75
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	62.73
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	62.73
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	62.73
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	62.72
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	62.72
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	62.67
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	62.63
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	62.62
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	62.58
(1,149)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	2	62.57
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	62.57
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	62.56
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	62.55
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	62.52
(1,176)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	62.52
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	62.48
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	62.47
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	62.44
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	62.44
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	62.37
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	11	62.33
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	62.32
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	62.3
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	62.25
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	62.25
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	62.25
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	62.23
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	13	62.16
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	62.16
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	62.08
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	62.06
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	62.05
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	2	62.04
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	62.03
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	62.02
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	4	61.99
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	61.97
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	10	61.96
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	61.96
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	61.93
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	17	61.93
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	61.92
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	61.92
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	61.91
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	61.9
(1,368)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	61.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	61.81
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	61.8
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	9	61.8
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	61.78
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1	61.78
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	61.77
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	61.77
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	61.75
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	61.75
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	61.72
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	61.69
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	61.69
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	61.68
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	61.65
(1,285)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	61.65
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	61.61
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	61.58
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	61.57
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	61.52
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	61.51
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	61.51
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	61.51
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	61.47
(1,265)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	61.46
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	61.45
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	61.45
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	61.45
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	13	61.44
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	61.43
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	61.42
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	61.41
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	18	61.37
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	61.35
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	61.35
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	61.34
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	61.33
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	61.28
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	61.26
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	61.21
(1,63)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	61.21
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	19	61.18
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	61.16
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	14	61.14
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	61.14
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	61.14
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	61.11
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	61.1
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	61.09
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	61.08
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	61.08
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	61.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	61.07
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	60.96
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	60.9
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	60.88
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	60.88
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	60.87
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	60.86
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	60.81
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	60.8
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	60.8
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	60.79
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	60.79
(1,522)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	60.77
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	60.77
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	2	60.76
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	60.73
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	60.67
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	60.66
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	60.64
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	60.63
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	60.62
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	60.61
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	60.59
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	6	60.58
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	60.56
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	60.54
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	60.53
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	60.51
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	60.48
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	60.46
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	5	60.41
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	60.4
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	60.37
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	60.36
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	60.36
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	60.34
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	60.34
(1,307)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	3	60.33
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	60.31
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	60.3
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	60.29
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	60.24
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	60.21
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	60.21
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	60.08
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	60.08
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	8	60.07
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	60.05
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	60.05
(1,274)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	60.03
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	60.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	60.01
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	60.01
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	59.97
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	5	59.96
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	59.86
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	59.84
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	17	59.84
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	59.84
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	59.84
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	59.84
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	59.82
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	59.81
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	59.79
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	59.79
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	59.78
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	59.78
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	59.77
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	59.76
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	59.74
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	59.73
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	59.72
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	59.71
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	59.69
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	59.69
(1,219)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	59.69
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	59.68
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	59.68
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	59.66
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	59.64
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	59.63
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	59.62
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	59.6
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	59.56
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	59.55
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	59.54
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	59.54
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	59.54
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	59.54
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	59.53
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	59.53
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	59.53
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	59.53
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	59.51
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	59.5
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	59.49
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	59.47
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	59.46
(1,280)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	59.46
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	59.45
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	59.41
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	59.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	59.37
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	59.36
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	59.34
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	59.31
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	59.31
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	59.3
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	59.28
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	59.24
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	59.22
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	59.2
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	59.16
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	59.15
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	59.14
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	59.12
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	59.08
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	59.07
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	59.06
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	59.06
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	59.06
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	59.03
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	59.03
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	59.03
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	59.02
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	58.99
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	5	58.99
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	58.97
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	58.96
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	58.96
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	58.95
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	58.92
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	58.92
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	58.91
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	58.88
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	58.86
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	58.83
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	5	58.81
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	58.8
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	58.78
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	58.77
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	58.75
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	58.74
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	58.73
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	58.72
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	9	58.71
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	58.71
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	58.69
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	58.69
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	58.67
(1,494)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	58.62
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	58.62
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	58.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	58.59
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	58.55
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	58.54
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	58.54
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	58.52
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	58.51
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	58.51
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	8	58.5
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	58.49
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	18	58.48
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	58.48
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	11	58.48
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	58.48
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	58.48
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	58.42
(1,463)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	58.42
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	58.41
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	58.4
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	58.39
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	58.36
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	58.32
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	58.31
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	58.29
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	58.29
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	58.27
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	58.24
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	58.24
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	18	58.21
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	58.21
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	58.21
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	58.18
(1,502)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	58.17
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	58.17
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	58.17
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	58.16
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	58.15
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	58.15
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	58.12
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	58.1
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	58.1
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	58.08
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	58.08
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	58.04
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	58.03
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	58.02
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	58.01
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	58.0
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	57.99
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	18	57.98
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	57.98
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	5	57.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	57.96
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	57.91
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	57.84
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	57.84
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	57.84
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	57.83
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	57.81
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	57.8
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	57.8
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	57.79
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	57.79
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	15	57.76
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	57.75
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	57.75
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	57.72
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	57.72
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	57.71
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	57.68
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	57.68
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	57.67
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	57.63
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	57.59
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	57.58
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	57.56
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	57.56
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	57.53
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	57.52
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	14	57.52
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	57.51
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	57.5
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	57.48
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	57.47
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	57.46
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	57.45
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	57.45
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	57.44
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	57.43
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	57.42
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	57.38
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	57.38
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	57.32
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	7	57.3
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	57.3
(1,74)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	57.3
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	57.28
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	57.28
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	57.24
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	6	57.22
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	57.21
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	57.19
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	57.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	57.16
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	57.14
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	57.13
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	57.13
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	57.12
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	57.1
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	57.1
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	57.07
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1	57.05
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	57.02
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	57.02
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	57.02
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	57.01
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	57.0
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	57.0
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	57.0
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	56.99
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	56.99
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	56.98
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	56.94
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	56.93
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	15	56.93
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	56.91
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	56.91
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	56.89
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	56.89
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	56.88
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	56.88
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	56.87
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	56.86
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	56.82
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	56.82
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	56.79
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	56.79
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	56.79
(1,458)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	56.77
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	56.77
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	56.76
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	56.75
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	56.69
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	56.68
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	7	56.67
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	56.64
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	56.64
(1,151)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	56.64
(1,134)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	56.64
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	56.63
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	19	56.61
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	56.58
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	56.58
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	56.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	56.54
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	56.54
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	56.52
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	18	56.47
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	56.46
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	56.45
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	56.43
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	56.42
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	56.41
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	56.41
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	56.4
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	56.39
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	56.38
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	56.37
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	56.35
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	56.35
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	56.34
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	56.32
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	56.32
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	56.28
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	56.28
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	15	56.26
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	56.24
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	56.22
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	2	56.21
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	56.21
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	56.21
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	56.19
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	56.19
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	56.19
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	56.18
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	56.18
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	56.18
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	56.17
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	56.17
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	56.16
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	56.15
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	56.13
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	56.11
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	56.1
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	56.05
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	56.04
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	56.02
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	56.01
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	56.01
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	55.99
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	55.98
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	8	55.98
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	55.96
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	55.95
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	55.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	55.92
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	55.92
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	13	55.89
(1,477)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	55.87
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	55.87
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	55.85
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	55.84
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	55.83
(1,286)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	55.82
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	55.82
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	55.82
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	55.82
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	55.81
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	55.73
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	11	55.72
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	55.72
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	55.71
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	55.7
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	10	55.68
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	55.68
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	55.65
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	55.65
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	6	55.64
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	55.64
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	55.63
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	55.63
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	55.55
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	55.54
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	8	55.53
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	55.52
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	55.52
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	55.49
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	16	55.48
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	55.47
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	55.46
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	55.46
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	55.45
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	55.45
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	55.44
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	7	55.42
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	55.41
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	55.41
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	55.41
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	55.4
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	55.39
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	55.38
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	55.37
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	8	55.35
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	55.33
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	55.31
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	55.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	55.27
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	55.27
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	55.26
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1	55.25
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	2	55.23
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	55.22
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	55.2
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	55.18
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	55.17
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	55.17
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	55.17
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	55.16
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	55.16
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	55.15
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	55.15
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	55.13
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	55.13
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	55.13
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	55.12
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	55.08
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	55.06
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	55.05
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	55.04
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	55.01
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	55.0
(1,129)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	54.98
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	54.97
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	54.97
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	54.95
(1,238)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	54.94
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	54.94
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	54.93
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	54.92
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	54.9
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	54.9
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	54.88
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	54.88
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	2	54.88
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	54.85
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	54.85
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	54.83
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	54.83
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	13	54.83
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	54.8
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	54.79
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	54.78
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	18	54.77
(1,305)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	54.73
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	54.72
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	54.72
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	54.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	54.71
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	54.71
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	54.7
(1,114)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	54.69
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	54.66
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	54.66
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	54.66
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	54.64
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	54.63
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	3	54.63
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	54.62
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	9	54.56
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	54.49
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	54.48
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	54.48
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	54.47
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	54.45
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	19	54.45
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	54.42
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	54.42
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	54.41
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	11	54.39
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	54.39
(1,531)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	54.35
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	54.33
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	54.31
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	54.29
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	54.22
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	54.21
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	54.21
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	54.2
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	54.18
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	11	54.16
(1,29)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	54.15
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	8	54.12
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	54.1
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	54.08
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	54.04
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	54.03
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	54.01
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	54.0
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	54.0
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	53.99
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	14	53.98
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	53.97
(1,511)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	53.96
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	53.96
(1,181)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	53.96
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	53.96
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	53.94
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	9	53.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	53.92
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	53.91
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	53.9
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	53.88
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	53.88
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	53.87
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	53.86
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	53.84
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	53.83
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	53.81
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	53.8
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	53.78
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	53.77
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	5	53.76
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	14	53.73
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	53.73
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	4	53.71
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	53.7
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	53.69
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	53.65
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	53.65
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	53.64
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	53.62
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	53.62
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	53.61
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	53.58
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	53.57
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	53.55
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	53.53
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	53.53
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	53.51
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	53.5
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	53.49
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	53.47
(1,380)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	53.46
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	53.46
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	53.43
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	53.38
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	53.36
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	53.33
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	53.33
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	53.32
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	53.31
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	53.3
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	53.29
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	12	53.27
(1,397)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	53.25
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	53.25
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	53.25
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	53.25
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	53.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	53.21
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	53.2
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	20	53.18
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	16	53.17
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	53.17
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	53.17
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	53.16
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	5	53.15
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	53.15
(1,111)	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	53.14
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	53.13
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	53.12
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	53.1
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	53.1
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	53.09
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	53.08
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	53.06
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	4	53.05
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	53.01
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	53.01
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	52.99
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	52.98
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	52.97
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	15	52.97
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	19	52.96
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	52.96
(1,361)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	9	52.94
(1,120)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	18	52.93
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	52.88
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	52.88
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1	52.86
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	52.86
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	52.86
(1,47)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	52.86
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	52.85
(1,402)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	52.85
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	52.85
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	52.84
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	52.82
(1,177)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	52.82
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	52.81
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	52.78
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	52.77
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	52.75
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	52.75
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	52.74
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	52.7
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	52.67
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	52.67
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	52.64
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	52.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	52.63
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	52.6
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	52.59
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	52.59
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	52.58
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	52.57
(1,542)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	52.56
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	52.55
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	52.55
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	52.47
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	52.47
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	52.47
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	52.45
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	52.44
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	52.42
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	12	52.41
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	10	52.4
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	52.37
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	52.36
(1,105)	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	52.32
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	52.31
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	17	52.29
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	52.29
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	52.28
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	52.27
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	52.26
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	52.22
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	52.21
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	52.17
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	52.15
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	52.12
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	52.12
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	52.11
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	52.1
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	52.05
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	52.03
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1	52.0
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	51.97
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	51.97
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	51.97
(1,358)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	4	51.96
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	51.96
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	51.95
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	51.92
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	51.92
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	51.89
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	3	51.88
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	7	51.87
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	51.86
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	51.85
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	51.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	51.83
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	51.79
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	51.79
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	51.77
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	51.77
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	51.73
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	51.72
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	51.7
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	51.7
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	51.7
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	12	51.65
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	51.63
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	51.61
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	51.57
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	51.57
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	7	51.53
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	51.52
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	51.49
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	51.47
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	2	51.44
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	51.44
(1,128)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	51.43
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	51.42
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	51.42
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	51.4
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	51.37
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	51.36
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	51.34
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	51.31
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	51.29
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	51.29
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	51.28
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	51.28
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	17	51.28
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	51.28
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	51.27
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	51.27
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	51.21
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	51.2
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	51.2
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	51.15
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	51.13
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	51.13
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	51.13
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	51.1
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	51.08
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	15	51.06
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	16	51.04
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	51.03
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	51.02
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	51.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	50.96
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	50.95
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	50.93
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	50.92
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	50.92
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	4	50.91
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	50.91
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	50.9
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	50.89
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	50.89
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	50.89
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	6	50.88
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	50.88
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	50.87
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	50.86
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	50.84
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	50.84
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	50.83
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	50.83
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	50.82
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	50.82
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	50.8
(1,179)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	50.8
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	50.79
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	50.78
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	50.78
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	50.76
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	50.73
(1,392)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	50.71
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	50.7
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	3	50.69
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	50.67
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	50.66
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	13	50.65
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	50.65
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	50.65
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	50.64
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	50.63
(1,311)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	50.61
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	10	50.58
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	50.58
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	50.53
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	50.51
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	50.51
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	50.51
(1,377)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	50.49
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	50.45
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	5	50.43
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	50.43
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	50.41
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	50.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	50.41
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	50.41
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	50.39
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	50.38
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	50.37
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	50.37
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	50.36
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	50.3
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	50.29
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	50.29
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	50.29
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	50.26
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	50.26
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	50.25
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	50.24
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	50.22
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	50.19
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	50.19
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	50.17
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	50.16
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	50.15
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	50.13
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	50.12
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	50.09
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	50.07
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	50.07
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	50.06
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	50.05
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	5	50.01
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	49.97
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	49.91
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	49.9
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	49.89
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	49.89
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	15	49.88
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	49.88
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	49.87
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	49.87
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	49.87
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	49.83
(1,487)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	49.81
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	49.81
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	49.74
(1,90)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	49.73
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	49.72
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	49.72
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	49.72
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	10	49.69
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	49.68
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	49.68
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	49.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	49.67
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	49.65
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	49.65
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	49.65
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	49.64
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	49.64
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	49.62
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	49.61
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	49.61
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	49.57
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	49.53
(1,130)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	19	49.52
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	49.51
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	49.51
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	49.5
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	49.5
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	49.5
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	49.49
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	49.48
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	49.48
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	17	49.47
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	4	49.46
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	49.46
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	49.45
(1,215)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	49.44
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	49.44
(1,291)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	49.43
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	49.41
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	49.41
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	49.38
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	49.33
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	49.27
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	49.26
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	49.26
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	49.25
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	49.24
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	49.22
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	49.21
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	49.2
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	17	49.19
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	11	49.19
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	49.15
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	49.13
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	49.12
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	49.11
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	49.08
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	49.06
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	49.05
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	49.02
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	49.0
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	48.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	48.94
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	9	48.92
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	48.92
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	48.85
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	48.84
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	48.84
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	48.82
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	48.82
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	48.81
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	48.8
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	48.79
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	48.77
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	48.75
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	16	48.72
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	48.64
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	48.6
(1,372)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	48.54
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	48.53
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	48.49
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	48.46
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	48.43
(1,451)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	48.4
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	48.37
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	48.36
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	48.32
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	48.32
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	18	48.31
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	16	48.31
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	48.3
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	48.3
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	48.3
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	48.29
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	48.29
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	48.28
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	48.27
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	48.24
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	48.2
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	48.19
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	48.18
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	48.17
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	48.16
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	48.13
(1,212)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	48.13
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	48.11
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	48.1
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	48.08
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	48.06
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	48.06
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	48.05
(1,331)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	9	48.03
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	48.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	48.01
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	8	47.98
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	47.98
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	47.95
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	47.93
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	47.91
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	47.91
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	47.89
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	47.88
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	47.88
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	47.88
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	47.86
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	47.86
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	47.86
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	47.86
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	47.85
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	47.85
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	47.85
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	3	47.82
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	47.82
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	47.81
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	13	47.81
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	47.78
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	47.77
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	47.76
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	47.75
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	47.75
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	47.74
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	47.74
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	47.73
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	47.72
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	47.72
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	47.7
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	47.67
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	47.65
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	10	47.64
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	47.6
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	47.58
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	47.56
(1,89)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	47.55
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	47.55
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1	47.54
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	4	47.51
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	47.51
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	47.51
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	47.5
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	47.48
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	47.46
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	47.46
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	47.45
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	47.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	47.43
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	47.41
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	47.41
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	47.4
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	47.39
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	47.38
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	47.36
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	47.3
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	47.3
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	47.29
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	47.28
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	47.26
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	47.24
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	47.2
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	47.2
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	47.19
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	47.19
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	47.19
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	47.15
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	47.15
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	47.11
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	47.11
(1,452)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	47.1
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	19	47.09
(1,327)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	47.09
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	47.09
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	47.07
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	47.05
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	47.03
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	47.03
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	47.03
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	47.02
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	47.0
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	46.99
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	46.99
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	17	46.98
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	46.97
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	46.97
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	46.97
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	46.96
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	46.94
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	46.93
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	19	46.91
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	46.9
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	46.87
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	46.87
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	46.86
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	46.85
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	46.84
(1,365)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	46.83
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	46.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	46.8
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	46.78
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	46.78
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	46.76
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	46.76
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	46.76
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	46.76
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	46.71
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	46.68
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	46.68
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	10	46.66
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	46.65
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	46.64
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	46.6
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	46.6
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	46.58
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	46.56
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	46.54
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	46.54
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	46.53
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	46.52
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	7	46.44
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	46.43
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	6	46.42
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	46.4
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	46.39
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	46.38
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	46.32
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	46.31
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	46.27
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	46.25
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	46.24
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	12	46.22
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	46.22
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	46.21
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	46.2
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	46.19
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	46.18
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	46.18
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	46.17
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	46.15
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	46.15
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	46.15
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	12	46.14
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	46.12
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	46.12
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	46.1
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	45.98
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	45.96
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	45.96
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	45.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	45.91
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	6	45.91
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	45.91
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	45.9
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	45.89
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	45.87
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	45.87
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	45.85
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	45.77
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	45.76
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	45.73
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	45.72
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	45.71
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	45.71
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	45.71
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	45.67
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	45.66
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	45.63
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	45.62
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	45.61
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	45.61
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	45.58
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	45.56
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	45.56
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	45.53
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	14	45.5
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	45.5
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	45.49
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	45.47
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	45.47
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	45.46
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	45.45
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	45.45
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	45.43
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	45.35
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	45.32
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	45.3
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	45.29
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	45.28
(1,180)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	45.25
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	45.23
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	12	45.2
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	45.2
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	45.18
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	7	45.17
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	45.14
(1,444)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	45.13
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	45.13
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	45.12
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	45.09
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	45.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	2	45.08
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	7	45.06
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1	45.06
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	45.05
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	45.03
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	45.01
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	45.0
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	44.99
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	44.99
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	44.98
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	44.95
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	44.92
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	44.88
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	44.87
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	44.86
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	44.86
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	44.85
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	44.84
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	44.83
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	44.82
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	44.81
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	4	44.79
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	44.79
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	14	44.78
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	8	44.78
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	44.76
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	44.69
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	44.68
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	44.68
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	14	44.6
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	9	44.59
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	44.58
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	44.57
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	44.57
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	44.57
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	11	44.55
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	44.52
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	44.5
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	44.5
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	44.5
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	13	44.49
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	44.41
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	44.41
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	44.39
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	44.37
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	44.34
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	44.34
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	2	44.33
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	44.28
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	44.27
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	11	44.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	20	44.25
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	44.25
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	3	44.24
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	44.23
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	44.21
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	6	44.2
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	44.18
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	44.16
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	20	44.13
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	44.12
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	44.11
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	17	44.09
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	44.08
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	19	44.08
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	44.08
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	9	44.07
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	44.0
(1,216)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	43.97
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	43.96
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	43.94
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	43.94
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	43.93
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	13	43.92
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	7	43.91
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	43.88
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	43.86
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	43.86
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	43.86
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	43.85
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	43.82
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	8	43.79
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	43.76
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	43.76
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	43.75
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	43.73
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	43.73
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	43.71
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	43.69
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	43.69
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	43.67
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	43.65
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	43.64
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	43.63
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	43.62
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	43.61
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	43.6
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	43.59
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	43.58
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	43.58
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	43.58
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	15	43.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	5	43.57
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	43.57
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	43.55
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	19	43.52
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1	43.51
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	43.5
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	3	43.49
(1,69)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	43.49
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	43.46
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	12	43.46
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	43.46
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	43.42
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	43.42
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	43.39
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	43.38
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	43.38
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	10	43.38
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	13	43.34
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	43.34
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	43.31
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	43.3
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	7	43.29
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	43.29
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	43.27
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	43.27
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	2	43.26
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	43.23
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	43.19
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	18	43.17
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	43.17
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	43.17
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	43.16
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	43.14
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	43.14
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	43.13
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	43.13
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	43.11
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	43.11
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	43.1
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	43.09
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	43.07
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	43.07
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	43.06
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	43.05
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	43.03
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	43.02
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	43.0
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	43.0
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	43.0
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	42.97
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	42.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	42.96
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	42.96
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	16	42.94
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	42.93
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	42.92
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	42.89
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	42.89
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	17	42.87
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	42.87
(1,530)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	2	42.85
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	42.85
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	42.84
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	42.83
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	42.82
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	42.81
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	42.79
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	42.78
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	42.76
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	42.73
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	42.71
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	42.71
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	42.67
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	42.59
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	42.55
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	42.55
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	42.55
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	42.55
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	42.51
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	5	42.5
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	42.5
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	13	42.48
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	42.48
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	11	42.46
(1,50)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	42.46
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	42.45
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	42.45
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	42.42
(1,39)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	42.41
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	18	42.4
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	42.39
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	18	42.37
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	42.37
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	42.33
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	16	42.33
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	15	42.32
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	42.32
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	16	42.31
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	42.31
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	42.3
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	42.28
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	42.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	42.23
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	42.21
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	42.19
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	42.16
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	42.16
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	42.14
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	3	42.11
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	42.1
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	42.09
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	42.08
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	42.07
(1,245)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	42.03
(1,507)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	41.99
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	41.99
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	41.98
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	41.97
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	41.96
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	41.93
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	41.92
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	41.92
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	41.92
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	41.92
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	4	41.92
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	41.9
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	41.89
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	41.87
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	41.87
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	18	41.83
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	41.83
(1,505)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	19	41.79
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	41.78
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	41.78
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	41.77
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	41.77
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	41.76
(1,435)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	41.75
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	41.74
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	41.7
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	41.69
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	41.69
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	41.67
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	41.66
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	9	41.63
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	41.62
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	41.6
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	41.6
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	41.6
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	41.59
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	3	41.58
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	41.58
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	41.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	41.57
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	41.56
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	41.55
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	41.55
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	41.55
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	41.52
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	41.52
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	41.51
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	41.5
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	41.49
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	41.49
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	41.48
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	41.48
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	41.47
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	16	41.46
(1,227)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	41.46
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	41.45
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	41.44
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	41.43
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	41.42
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	41.42
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	41.41
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	41.38
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	41.3
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	41.25
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	11	41.25
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	41.24
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	41.22
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	6	41.21
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	41.2
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	41.18
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	41.17
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	41.17
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	41.13
(1,537)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	12	41.12
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	7	41.09
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	41.08
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	11	41.08
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	41.08
(1,107)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	41.07
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	41.03
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	41.03
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	41.03
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	41.0
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	41.0
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	40.98
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1	40.98
(1,338)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	40.97
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	40.95
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	40.92
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	40.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	40.92
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	19	40.91
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	18	40.91
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	40.91
(1,271)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	5	40.89
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	40.89
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	40.87
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	40.86
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	40.84
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	40.83
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	40.83
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	40.82
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	40.82
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	40.81
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	40.8
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	40.78
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	40.77
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	40.77
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	40.75
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	9	40.64
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	40.63
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	40.61
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	40.61
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	40.6
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	40.6
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	2	40.58
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	40.58
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	40.58
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	40.56
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	40.54
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	40.54
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	40.54
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	40.53
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	9	40.51
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	40.5
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	15	40.47
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	40.47
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	40.45
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	40.44
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	40.42
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	40.42
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	40.4
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	40.4
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	40.37
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	40.33
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	2	40.32
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	40.32
(1,214)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	40.32
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	40.31
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	40.31
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	40.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,565)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	40.28
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	40.27
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	3	40.26
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	40.25
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	40.25
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	17	40.23
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	40.22
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	40.18
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	12	40.14
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	40.14
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	40.14
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	40.13
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	40.12
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	40.11
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	40.09
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	40.08
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	40.08
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	40.07
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	40.06
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	40.06
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	4	40.05
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	40.05
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	4	40.05
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	40.04
(1,226)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	40.04
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	40.04
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	40.03
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	40.0
(1,340)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	39.99
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	39.99
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	39.99
(1,82)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	39.98
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	39.97
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	39.97
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	39.96
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	39.94
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	39.94
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	39.93
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	39.91
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	39.89
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	8	39.89
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	39.86
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	39.84
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	39.84
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	14	39.83
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	39.83
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	39.82
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	39.81
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	19	39.78
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	39.74
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	39.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	39.73
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	39.71
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	39.71
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	39.7
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	8	39.7
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	39.7
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	39.66
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	18	39.65
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	39.63
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	16	39.6
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	39.59
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	39.57
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	6	39.56
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	19	39.56
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	39.55
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	39.52
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	39.47
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	39.45
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	15	39.44
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	6	39.39
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	39.37
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	39.35
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	39.35
(1,66)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	39.33
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	39.32
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	39.28
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	39.26
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	39.25
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	39.24
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	39.24
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	39.22
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	39.21
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	39.21
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	39.21
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	39.19
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	39.17
(1,288)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	39.14
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	39.14
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	39.12
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	39.11
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	39.11
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	39.09
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	39.08
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	39.06
(1,543)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	5	39.05
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	39.05
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	39.05
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	39.04
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	39.04
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	39.03
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	39.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	38.99
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	38.97
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	5	38.96
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	6	38.93
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	38.89
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	38.88
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	38.86
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	38.83
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	38.81
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	38.79
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	38.79
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	38.77
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	38.75
(1,528)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	38.73
(1,261)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	38.71
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	38.69
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	17	38.69
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	38.66
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	2	38.66
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	6	38.64
(1,249)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	38.61
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	38.6
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	38.59
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	38.57
(1,479)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	10	38.57
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	38.56
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	38.55
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	38.55
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	38.55
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	38.53
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	38.52
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	38.51
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	38.5
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	11	38.48
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	38.47
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	38.44
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	14	38.44
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	38.39
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	38.36
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	38.35
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	5	38.33
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	38.32
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	38.31
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	38.25
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	38.25
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	38.25
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	38.23
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	38.22
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	38.22
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	38.21
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	38.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	38.17
(1,423)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	38.15
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	38.15
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1	38.15
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	38.15
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	38.12
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	38.12
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	38.1
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	7	38.1
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	38.08
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	38.08
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	38.05
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	38.05
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	38.02
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	38.01
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	7	38.01
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	37.99
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	37.98
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	37.97
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	37.96
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	13	37.96
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	37.93
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	15	37.93
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	37.92
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	12	37.88
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	37.87
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	13	37.83
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	37.8
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	37.79
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1	37.79
(1,418)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	37.79
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	37.79
(1,405)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	37.78
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	37.77
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	37.76
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	37.72
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	37.72
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	37.7
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	37.69
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	37.69
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	37.69
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	37.67
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	37.67
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	37.65
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	37.64
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	9	37.64
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	37.6
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	37.6
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	37.59
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	37.58
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	37.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	7	37.55
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	37.55
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	37.55
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	3	37.53
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	37.51
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	37.5
(1,429)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	37.47
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	37.46
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	37.45
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	37.44
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	37.44
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	37.43
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	37.41
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	37.38
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	37.38
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	37.37
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	3	37.36
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	37.33
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	37.33
(1,260)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	37.32
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	37.32
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	37.31
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	37.29
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	37.27
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	37.24
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	37.22
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	37.22
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	4	37.21
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	37.21
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	17	37.19
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	37.18
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	37.16
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	37.14
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	37.14
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	8	37.11
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	37.11
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	16	37.1
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	37.1
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	37.08
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	37.08
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	37.07
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	37.04
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	11	36.97
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	36.95
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	36.95
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	36.94
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	36.91
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	36.87
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	36.87
(1,396)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	36.86
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	36.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	36.85
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	36.84
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	36.81
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	36.8
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	36.79
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	36.78
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	36.78
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	36.77
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	36.77
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	10	36.72
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	5	36.68
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	36.67
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	36.66
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	36.66
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	36.65
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	6	36.64
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	36.63
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	36.61
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	36.6
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	36.59
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	36.59
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	36.58
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	36.54
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	36.51
(1,277)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	36.51
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	36.5
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	36.49
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	36.49
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	36.48
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	36.47
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	36.42
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	36.42
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	36.41
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	13	36.4
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	36.4
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	36.38
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	15	36.38
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	36.38
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	15	36.37
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	36.37
(1,77)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	16	36.37
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	2	36.37
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	36.35
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	36.33
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	36.31
(1,510)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	36.28
(1,550)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	36.25
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	9	36.25
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	36.21
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	36.2
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	36.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	36.18
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	36.16
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	6	36.15
(1,503)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	10	36.15
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	36.15
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	36.14
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	36.14
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	36.12
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	36.12
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	36.09
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	36.09
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	36.08
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	36.07
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	6	36.07
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	36.07
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	36.06
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	36.05
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	36.04
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	36.04
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	36.01
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	36.01
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	35.97
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	15	35.92
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	35.91
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	35.89
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	35.89
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	35.89
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	35.88
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	35.85
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	35.83
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	35.83
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	35.83
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	35.82
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	17	35.81
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	35.78
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	18	35.78
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	35.77
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	35.76
(1,474)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	35.75
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	35.74
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	35.74
(1,30)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	35.74
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	35.74
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	35.72
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	35.72
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	35.71
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	35.7
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	35.69
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	35.61
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	35.61
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	35.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	35.58
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	35.56
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	8	35.55
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	35.51
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	35.51
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	35.5
(1,538)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	35.48
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	35.48
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	35.48
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	35.47
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	35.45
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	35.42
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	35.41
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	35.41
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	35.4
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	35.39
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	35.37
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	35.36
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	35.36
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	35.34
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	35.32
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	35.32
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	35.32
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	35.29
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	35.28
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	35.27
(1,491)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	35.26
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	35.26
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	35.25
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	35.25
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	35.23
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	35.22
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	35.19
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	35.18
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	35.18
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	35.16
(1,499)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	35.13
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	35.12
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	35.12
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	35.11
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	35.1
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	35.09
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	35.08
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	35.07
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	35.06
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	35.05
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	7	35.04
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	35.04
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	35.03
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	35.03
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	35.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	35.0
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	34.99
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	34.98
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	34.98
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	34.96
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	34.94
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	34.94
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	34.93
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	3	34.92
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	34.92
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	34.92
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	34.91
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	5	34.9
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	34.9
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	34.89
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	34.83
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	34.81
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	34.8
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	34.78
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	34.76
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	34.76
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	34.71
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	34.69
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	12	34.67
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	34.65
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	34.63
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	34.63
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	8	34.62
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	34.62
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	34.61
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	34.61
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	34.6
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	34.6
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	34.59
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	34.56
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	34.56
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	14	34.56
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	34.51
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	34.51
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	15	34.51
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	34.5
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	34.5
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	34.47
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	34.46
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	34.46
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	34.45
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	34.41
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	34.41
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	11	34.4
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	34.4
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	34.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	34.39
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	34.39
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	34.38
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	34.38
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	34.37
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	34.36
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	34.36
(1,23)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	34.36
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	34.33
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	34.33
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	34.29
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	34.28
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	34.27
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	34.25
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	34.25
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	11	34.25
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	34.25
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	34.24
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	34.24
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	6	34.23
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	34.21
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	34.21
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	34.19
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	34.18
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	34.18
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	34.18
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	34.17
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	34.16
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	34.16
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	34.15
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	34.15
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	34.14
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	34.12
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	34.12
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	34.1
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	34.09
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	34.09
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	34.07
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	34.07
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	34.05
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	34.04
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	34.03
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	34.03
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	34.02
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	34.02
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	33.99
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	33.94
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1	33.93
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	33.92
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	4	33.91
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	33.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	33.88
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	33.86
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	33.85
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	33.82
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	33.81
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	33.8
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	33.79
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	33.79
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	2	33.77
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	33.77
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	33.77
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	33.76
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	33.72
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	33.7
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	33.7
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	33.69
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	18	33.67
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	33.66
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	33.66
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	33.65
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	33.65
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	33.64
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	33.64
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	33.62
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	2	33.62
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	33.6
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	33.59
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	33.58
(1,322)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	33.57
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	33.56
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	33.55
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	12	33.51
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	33.51
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	33.49
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	19	33.48
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	33.48
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	33.48
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	13	33.46
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	33.45
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	33.44
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	33.43
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	33.42
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	33.4
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	33.39
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	33.37
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	33.36
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	33.34
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	33.33
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	33.33
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	33.32
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	33.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	14	33.31
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	33.31
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	33.3
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	33.3
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	33.28
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	15	33.26
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	33.26
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	33.24
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	33.23
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	33.23
(1,48)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	33.19
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	33.18
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	33.16
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	33.16
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	33.15
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	33.14
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	33.13
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	15	33.12
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	5	33.11
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	33.09
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	33.09
(1,65)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	33.09
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	33.09
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	33.07
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	33.06
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	33.05
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	33.04
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	33.03
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	33.0
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	32.99
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	32.98
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	32.95
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	32.93
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	32.9
(1,225)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	32.9
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	32.84
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	32.82
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	32.82
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	32.81
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	32.78
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	32.77
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	32.76
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	32.76
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	32.76
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	32.75
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	32.75
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	32.74
(1,10)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	32.74
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	32.72
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	32.7
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	32.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	32.69
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	32.68
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	32.67
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	32.66
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	32.66
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	32.66
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	32.64
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	32.64
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	13	32.6
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	32.59
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	32.57
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	32.56
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	11	32.54
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	32.51
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	32.48
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	32.48
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	32.47
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	32.47
(1,185)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	11	32.47
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	32.46
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	32.44
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	32.43
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	32.42
(1,360)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	32.42
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	32.42
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	32.42
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	32.35
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	32.32
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	32.32
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	32.32
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	9	32.32
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	32.31
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	32.29
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	32.27
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	32.26
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	32.25
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	32.22
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	32.22
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	32.21
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	32.19
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	32.15
(1,49)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	32.15
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	32.14
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	32.11
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	32.11
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	32.09
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	32.08
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	32.07
(1,460)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	32.04
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	32.03
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	32.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	32.02
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	32.02
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	32.0
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	31.98
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	31.98
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	31.96
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	15	31.95
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	9	31.95
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	31.95
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	31.93
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	31.93
(1,382)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	31.9
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	31.9
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	31.89
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	31.87
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	31.85
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	31.84
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	31.83
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	31.83
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	31.8
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	31.79
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	31.78
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	8	31.75
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	31.73
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	31.7
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	31.7
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	31.68
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	31.66
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1	31.63
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	31.62
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	31.61
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	31.6
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	31.6
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	31.59
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	31.57
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	31.56
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	31.56
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	31.55
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	31.55
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	31.53
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	31.52
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	31.52
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	31.51
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	31.48
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	31.48
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	31.47
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	31.44
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	31.44
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	31.4
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	31.35
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	31.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	31.33
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	31.33
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	31.31
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	31.31
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	31.29
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	31.29
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	31.27
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	31.26
(1,73)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	31.26
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	31.25
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	31.24
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	19	31.23
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	31.22
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	31.19
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	31.19
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	31.18
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	31.15
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	31.14
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	31.14
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	31.13
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	31.13
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	31.13
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	31.12
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	31.11
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	31.1
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	31.08
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	31.08
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	31.08
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	31.03
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	31.03
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	31.03
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	31.01
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	8	31.01
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	31.01
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	30.99
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	30.97
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	30.96
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	11	30.94
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	30.93
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	30.93
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	30.92
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	30.91
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	30.91
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	30.89
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	30.87
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	30.85
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	30.83
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	30.77
(1,544)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	10	30.74
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	30.7
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	30.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	30.7
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	30.64
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	30.63
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	30.63
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	30.61
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	30.61
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	30.59
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	19	30.59
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	30.59
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	30.58
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	30.57
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	30.57
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	30.57
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	30.56
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	30.56
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	30.56
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	30.54
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	30.53
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	30.52
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	30.51
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	30.48
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	30.47
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	30.44
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	13	30.42
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	30.42
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	30.41
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	30.4
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	30.35
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	20	30.34
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	30.34
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	30.31
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	30.31
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	30.3
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	30.29
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	30.29
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	30.29
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	30.28
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	30.27
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	30.24
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	30.2
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	30.2
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	30.15
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	30.13
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	30.13
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	30.1
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	30.08
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	30.05
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	30.05
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	30.03
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	30.03
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1	30.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	11	30.02
(1,53)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	29.96
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	29.95
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	29.95
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	29.9
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	29.9
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	11	29.89
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	29.88
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	29.87
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	29.85
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	29.85
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	2	29.82
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	29.82
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	29.79
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	29.78
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	29.74
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	29.74
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	29.74
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	29.73
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	29.73
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	29.73
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	14	29.69
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	29.68
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	29.67
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	29.65
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	29.65
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	29.64
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	29.63
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	29.62
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	7	29.61
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	29.6
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	29.57
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	29.57
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	29.54
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	29.54
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	29.52
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	29.52
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	29.51
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	29.49
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	29.45
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	29.44
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	29.43
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	29.42
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	29.42
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	29.41
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	29.41
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	16	29.41
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	29.4
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	29.4
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	29.39
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	29.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	29.35
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	29.35
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	29.31
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	29.31
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	29.3
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	29.27
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	29.27
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	29.26
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	3	29.24
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	29.24
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	29.23
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	29.23
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	29.21
(1,308)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	29.19
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	29.19
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	29.19
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	29.18
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	29.18
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	29.17
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	29.16
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	29.16
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	29.13
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	5	29.11
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	29.1
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	29.1
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	29.09
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	29.08
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	29.07
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	29.06
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	29.04
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	29.02
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	5	29.0
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	28.99
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	18	28.97
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	28.96
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	9	28.96
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	28.93
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	28.9
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	28.9
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	28.9
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	12	28.89
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	28.88
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	28.88
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	28.84
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	28.79
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	28.77
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	28.77
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	28.77
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	28.77
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	28.76
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	28.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	28.75
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	28.71
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	28.7
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	19	28.7
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	28.66
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	28.65
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	28.64
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	8	28.64
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	28.64
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	2	28.62
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	18	28.61
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	28.61
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	28.59
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	28.59
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	28.56
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	11	28.53
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	28.5
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	28.48
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	28.48
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	28.48
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	28.47
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	28.45
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	28.43
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	28.43
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	28.42
(1,428)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	28.41
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	28.39
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	28.38
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	28.38
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	28.37
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	14	28.35
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	28.34
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	28.33
(1,407)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	28.32
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	3	28.32
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	28.31
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	28.29
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	28.27
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	2	28.26
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	28.25
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	28.24
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	28.21
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	6	28.21
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	28.2
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	28.2
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	28.2
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	28.18
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	28.17
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	28.16
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	4	28.15
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	28.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	28.13
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	28.11
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	28.11
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	28.09
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	28.08
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	28.07
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	28.07
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	28.03
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	28.0
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	27.98
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	27.96
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	27.96
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	27.95
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	27.95
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	27.94
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	27.93
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	27.92
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	27.9
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	27.89
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	27.89
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	27.88
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	27.85
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	19	27.85
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	27.84
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	27.84
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	27.83
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	27.83
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	27.83
(1,218)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	27.82
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	27.81
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	27.81
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	27.8
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	3	27.8
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	27.77
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	4	27.77
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	27.75
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	27.73
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	12	27.71
(1,45)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	27.71
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	27.7
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	27.68
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	27.65
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	27.65
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	27.65
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	27.64
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	4	27.63
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	27.63
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	27.63
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	27.62
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	27.61
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	27.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	14	27.61
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	27.61
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	27.55
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	4	27.54
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	27.49
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	27.45
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	27.44
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	27.42
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	27.41
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	27.41
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	27.39
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	27.38
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	27.38
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	27.33
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	27.32
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	3	27.32
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	27.31
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	27.27
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	27.27
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	27.25
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	27.23
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	27.22
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	27.19
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	27.16
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	15	27.15
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	27.14
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	27.14
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	27.14
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	27.13
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	27.13
(1,24)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	27.13
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	27.12
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	27.12
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	27.11
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	27.11
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	27.1
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	27.1
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	27.09
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	27.07
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	27.07
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	27.07
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	27.05
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	27.04
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	27.04
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	27.03
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	27.01
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	27.0
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	7	27.0
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	26.97
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	26.96
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	26.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	26.95
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	26.94
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	26.93
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	26.92
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	14	26.89
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	26.89
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	12	26.88
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	26.84
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	26.84
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	26.84
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	26.83
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	26.83
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	26.81
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	9	26.8
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	26.8
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	26.79
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	26.76
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	26.76
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	26.76
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	26.74
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	26.71
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	26.71
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	26.7
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	26.68
(1,534)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	26.67
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	11	26.67
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	26.67
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	26.67
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	26.66
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	26.66
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	26.63
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	26.62
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	14	26.6
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	26.6
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	9	26.59
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	26.58
(1,389)	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	26.55
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	26.55
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	26.54
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	6	26.54
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	26.54
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	26.47
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	26.45
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	26.43
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	10	26.43
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	26.41
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	26.41
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	26.39
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	26.37
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	12	26.34
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	26.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	26.33
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	26.28
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	26.25
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	26.24
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	26.23
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	26.22
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	26.2
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	26.2
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	26.2
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	26.19
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	10	26.19
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	26.19
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	26.17
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	26.17
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	26.16
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	26.15
(1,455)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	26.15
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	26.15
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	26.15
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	26.15
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	26.14
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	26.14
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	26.14
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	26.11
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	26.1
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	26.08
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	26.08
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	26.07
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	26.07
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	26.06
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	26.02
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	26.01
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	26.01
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	26.0
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	25.99
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	25.99
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	25.98
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	25.98
(1,546)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	25.97
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	25.95
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	25.95
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	25.94
(1,210)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	25.93
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	25.91
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	25.86
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	25.86
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	25.85
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	16	25.84
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	25.83
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	25.83
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	25.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	25.81
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	25.81
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	25.8
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	25.78
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	25.78
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	25.78
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	25.77
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	25.76
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	25.75
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	25.74
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	25.73
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	5	25.73
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	25.7
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	25.67
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	25.63
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	25.63
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	17	25.62
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	25.61
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	25.58
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	25.57
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	25.56
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	25.56
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	25.55
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	25.55
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	13	25.54
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	25.54
(1,506)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	25.52
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	25.51
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	25.5
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	25.49
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	25.46
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	9	25.44
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	25.44
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	19	25.43
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	25.42
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	25.42
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	4	25.4
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	25.4
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	25.39
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	25.38
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	25.37
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	13	25.35
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	25.33
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	25.31
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	25.31
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	25.28
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	25.27
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	25.26
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	25.25
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	25.25
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	25.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	2	25.19
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	25.17
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	25.15
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	25.15
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	25.15
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	25.14
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	25.13
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	25.09
(1,188)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	25.09
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	25.09
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	20	25.07
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	25.06
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	25.04
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	24.99
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	24.99
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	24.98
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	24.98
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	24.98
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	24.97
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	24.97
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	24.97
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	24.95
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	18	24.94
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	24.94
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	24.91
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	24.89
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	24.87
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	15	24.86
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	10	24.86
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	24.86
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	24.85
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	24.8
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	24.8
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	5	24.78
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	24.77
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	24.74
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	24.72
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	9	24.72
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	24.7
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	24.7
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	8	24.7
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	11	24.7
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	24.7
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	13	24.68
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	24.67
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	24.66
(1,417)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	24.65
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	24.64
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	24.63
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	24.58
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	6	24.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	24.56
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	24.56
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	24.56
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	24.56
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	8	24.54
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	24.52
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	24.5
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	24.5
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	24.47
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	24.45
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	24.45
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	24.44
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1	24.43
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	24.43
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	24.42
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	24.42
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	24.4
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	24.39
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	24.39
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	24.37
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	24.36
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	24.36
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	24.35
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	24.35
(1,72)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	24.33
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	24.32
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	24.32
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	24.31
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	24.31
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	24.3
(1,166)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	20	24.3
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	10	24.3
(1,405)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	24.28
(1,40)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	9	24.26
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	24.24
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	24.23
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	24.21
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	24.21
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	24.2
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	24.2
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	17	24.2
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	24.19
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	24.18
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	24.18
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	24.17
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	24.16
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	8	24.15
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	24.15
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	18	24.14
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	15	24.14
(1,218)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	24.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	24.12
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	24.11
(1,7)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	24.06
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	24.05
(1,247)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	24.03
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	24.03
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	24.02
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	23.99
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	23.97
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	23.97
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	23.96
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	23.94
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	23.93
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	23.93
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	23.93
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	23.93
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	23.92
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	23.91
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	23.91
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	23.89
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	23.88
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	23.88
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	23.84
(1,103)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	23.81
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	23.78
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	23.72
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	23.72
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	23.72
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	23.71
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	23.7
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	3	23.7
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	23.69
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	23.68
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	23.68
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	5	23.68
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	15	23.67
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	23.66
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	23.65
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	23.65
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	8	23.64
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	16	23.63
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	23.62
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	23.62
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	23.62
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	23.61
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	7	23.61
(1,543)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	9	23.59
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	23.57
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	23.57
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	23.57
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1	23.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	23.51
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	23.51
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	2	23.5
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	23.49
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	6	23.49
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	23.49
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	14	23.48
(1,112)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1	23.48
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	23.47
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	15	23.45
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	23.44
(1,173)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	23.44
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	23.44
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	23.42
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	23.42
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	23.42
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	23.42
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	23.4
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	23.4
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	23.39
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	23.38
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	23.38
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	23.38
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	23.37
(1,354)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	23.35
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	23.35
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	23.35
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	23.35
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	23.33
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	23.33
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	23.3
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	23.3
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	23.27
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	23.27
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	23.26
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	23.26
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	23.23
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	23.23
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	23.23
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	23.23
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	23.22
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	23.2
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	23.19
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	23.17
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	23.16
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	23.15
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	23.13
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	23.13
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	23.13
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	23.12
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	23.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	23.12
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	23.12
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	8	23.11
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	23.11
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	23.11
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	23.1
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	23.07
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	23.05
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	23.04
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	23.04
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	23.04
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	23.03
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	23.01
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	22.99
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	22.99
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	22.99
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	22.98
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	22.96
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	22.95
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	22.95
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	22.94
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	22.94
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	22.93
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	22.91
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	22.9
(1,370)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	4	22.89
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	22.88
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	22.88
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	22.87
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	22.87
(1,55)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	22.87
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	22.84
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	22.84
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	22.83
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	22.83
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	22.82
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	22.82
(1,433)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	22.82
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	22.82
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	22.81
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	22.81
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	22.76
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	22.76
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	22.72
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	15	22.72
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	22.69
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	22.69
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	22.69
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	22.69
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	22.65
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	22.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	22.63
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	22.6
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	22.59
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	22.58
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	22.58
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	5	22.57
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	22.56
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	22.53
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	22.52
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	11	22.51
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	22.51
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	22.5
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	22.5
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	22.48
(1,38)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	22.48
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	22.47
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	22.47
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	22.45
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	10	22.43
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	22.42
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	22.42
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	22.4
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	22.39
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	22.38
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	22.38
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	22.38
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	22.38
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	22.38
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	22.36
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	22.36
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	22.35
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	22.34
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	22.32
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	22.32
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	22.31
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	22.3
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	22.3
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	22.3
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	22.28
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	22.27
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	22.23
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	22.19
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	22.16
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	9	22.16
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	22.15
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	22.15
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	22.15
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	18	22.14
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	22.12
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	22.11
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	22.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	22.1
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	22.08
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	22.06
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	16	22.06
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	22.06
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	22.04
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	22.03
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	22.0
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	22.0
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	21.99
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	21.98
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	21.97
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	21.95
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	21.94
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	21.94
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	21.93
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	21.92
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	21.91
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	21.88
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	21.88
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	21.85
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	21.84
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	21.83
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	21.83
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	21.81
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	21.81
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	21.81
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	21.79
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	21.79
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	21.78
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	21.77
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	21.74
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	21.71
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	21.71
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	21.69
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	21.68
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	21.65
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	21.64
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	21.62
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	21.62
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	21.62
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	21.6
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	21.6
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	21.58
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	21.57
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	21.53
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	13	21.52
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	21.51
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	2	21.48
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	21.45
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	21.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	21.44
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	21.43
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	21.42
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	19	21.41
(1,147)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	21.41
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	21.39
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	21.38
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	21.36
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	21.33
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	21.32
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	21.32
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	21.31
(1,532)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	21.3
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	21.29
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	21.28
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	21.27
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	21.26
(1,387)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	21.26
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	12	21.26
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	21.26
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	21.24
(1,269)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	21.24
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	4	21.21
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	21.2
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	21.2
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	21.19
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	21.19
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	21.18
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	21.18
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	21.17
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	21.17
(1,21)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	21.17
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	21.17
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	21.16
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	21.15
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	21.15
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	21.15
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	21.11
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	21.11
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	18	21.11
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	21.1
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	21.08
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	19	21.07
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	21.07
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	5	21.06
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	21.05
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	21.03
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	21.03
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	21.02
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	21.02
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	21.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	21.01
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	21.01
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	21.0
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	20.97
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	20.97
(1,70)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	20.97
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	20.96
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	20.96
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	20.95
(1,275)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	20.94
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	20.94
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	20.94
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	20.93
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	20.92
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	20	20.9
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	20.85
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	20.85
(1,85)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	20.85
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	20.84
(1,416)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	20.84
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	20.84
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	20.8
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	20.8
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	20.79
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	20.77
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	20.77
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	20.77
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	11	20.75
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	20.73
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	20.73
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	20.72
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	20.71
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	20.71
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	20.7
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	20.69
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	20.69
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	20.66
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	20.64
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	20.63
(1,54)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	20.61
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	20.6
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	20.58
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	20.58
(1,409)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	20.58
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	20.58
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	20.57
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	20.56
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	20.54
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	20.54
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	20.54
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	20.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	20.52
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	20.52
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	20.51
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	20.51
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	20.48
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	17	20.48
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	20.45
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	20.44
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	20.44
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	20.43
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	20.42
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	20.42
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	20.41
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	20.39
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	7	20.36
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	20.35
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	14	20.3
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	15	20.3
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	20.27
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	20.27
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	20.26
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	20.26
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1	20.26
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	20.25
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	20.25
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	20.22
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	20.22
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	20.21
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	20.19
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	20.18
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	20.17
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	20.15
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	20.15
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	20.14
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	20.14
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	20.13
(1,61)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	20.13
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	20.12
(1,319)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	20.09
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	20.08
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	20.08
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	20.07
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	20.07
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	20.07
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	20.06
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	20.06
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	3	20.06
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	20.02
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	19.99
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	19.99
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	19.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	19.95
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	19.93
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	19.92
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	19.92
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	19.9
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	19.9
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	19.87
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	19.87
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	19.87
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	19.86
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	19.86
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	19.84
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	19.82
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	19.82
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	19.8
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	19.8
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	19.8
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	19.79
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	19.78
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	19.78
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	19.77
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	3	19.77
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	19.76
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	19.76
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	19.76
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	19.75
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	19.75
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	19.74
(1,25)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	19.73
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	19.68
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	19.65
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	19.64
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	19.63
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	19.63
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	19.62
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	19.62
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	19.61
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	19.6
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	19.59
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	19.57
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	18	19.57
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	19.57
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	19.54
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	19.53
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	19.52
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	19.52
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	19.48
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	19.45
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	19.45
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	19.45
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	19.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	19.43
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	19.42
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	19.42
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	5	19.42
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	19.41
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	19.4
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	19.4
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	19.38
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	19.37
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	19.35
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	19.34
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	19.28
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	19.26
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	19.26
(1,20)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	19.25
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	19.25
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	19.22
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	19.2
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	19.2
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	19.19
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	19.16
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	19.16
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	19.15
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	19.15
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	19.15
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	19.13
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	19.13
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	19.13
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	19.11
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	19.06
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	19.06
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	19.06
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	19.03
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	19.03
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	19.01
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	19	18.97
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	18.96
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	18.96
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	18.96
(1,384)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	18.94
(1,44)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	18.94
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	18.92
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	18.92
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	18.92
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	18.91
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	18.91
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	18.9
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	18.88
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	18.86
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	18.86
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	18.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	5	18.85
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	18.85
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	18.84
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	18.83
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	18.82
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1	18.77
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	18.76
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	18.72
(1,486)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	6	18.69
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	18.69
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	19	18.69
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	18.68
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	18.68
(1,31)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	18.68
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	18.67
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	18.67
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	18.66
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	18.65
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	18	18.64
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	18.63
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	10	18.63
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	18.61
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	7	18.61
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	18.61
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	18.6
(1,256)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	18.6
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	18.59
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	18.57
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	18.54
(1,154)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1	18.54
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	18.53
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	18.51
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	18.5
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	18.5
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	18.49
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	18.48
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	18.48
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	18.45
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	18.45
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	18.42
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	18.41
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	18.4
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	18.4
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	18.39
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	18.37
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	18.36
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	8	18.32
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	18.28
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	18.27
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	18.25
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	4	18.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	18.23
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	3	18.23
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	18.22
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	18.22
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	18.22
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	18.2
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	18.19
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	18.18
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	18.18
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	18.15
(1,304)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	18.11
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	18.1
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	2	18.08
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	18.08
(1,495)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	17	18.08
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	18.07
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	18.05
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	18.05
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	18.01
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	18.01
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	18.0
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	17.98
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	17.89
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	17.89
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	17.87
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	17.86
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	17.86
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	17.85
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	14	17.84
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	17.84
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	16	17.83
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	17.83
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	17.81
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	17.8
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	17.79
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	6	17.78
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	17.75
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	17.73
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	17.71
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	17.71
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	17.71
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	7	17.69
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	17.67
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	17.66
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	17.65
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	17.64
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	17.61
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	17.6
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	9	17.59
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	17.58
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	20	17.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	17.56
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	17.54
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	17.54
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	17.54
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	17.53
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	17.5
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	6	17.49
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	17.48
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	11	17.47
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	17.46
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	17.45
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	17.45
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	17.43
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	17.42
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	17.41
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	17.37
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	17.37
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	17.35
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	17.34
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	17.34
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	2	17.32
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	17.32
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	17.3
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	13	17.3
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	17.29
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	17.29
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	17.28
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	17.28
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	17.28
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	17.26
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	17.26
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	17.25
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	17.24
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	17.23
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	10	17.2
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	17.2
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	17.18
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	20	17.17
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	17.15
(1,560)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	17.13
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	17.13
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	17.13
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	17.11
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	17.11
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	17.1
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	17.08
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	17.07
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	14	17.05
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	17.02
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	17.01
(1,253)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	17.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	17.01
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	17.0
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	4	17.0
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	16.97
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	16.94
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	16.93
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	16.92
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	16.91
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	16.9
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	16.87
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	16.86
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	16.85
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	16.81
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	16.81
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	16.8
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	16.79
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	16.79
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	16.78
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	16.78
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	16.77
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	16.77
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	16.76
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	16.75
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	16.75
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	16.75
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	16.74
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	16.73
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	16.73
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	16.73
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	16.7
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	16.69
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	16.67
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	16.66
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	8	16.64
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	16.62
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	9	16.6
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	16.6
(1,241)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	16.59
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	16.57
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	16.57
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	16.56
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	16.54
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	16.53
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	12	16.53
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	16.46
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	16.44
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	16	16.43
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	19	16.43
(1,324)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	16.42
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	16.42
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	16.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	16.41
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	16.38
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	16.36
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	12	16.35
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	16.33
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	16.33
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	16.3
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	16.28
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	16.27
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	16.27
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	16.22
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	10	16.22
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	16.21
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	13	16.2
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	16.17
(1,136)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	17	16.15
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	14	16.13
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	16.11
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	16.09
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	16.09
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	16.08
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	16.08
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	16.08
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	16.08
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	16.06
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	16.03
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	16.03
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	7	16.0
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	14	15.98
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	15.97
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	15.96
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	15.93
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	15.92
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	15.92
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	15.92
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	15.91
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	15.9
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	15.86
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	7	15.86
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	6	15.85
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	15.85
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	15.84
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	15.83
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	15.81
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	15.81
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	15.77
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	6	15.77
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	15.76
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	15.76
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	15.73
(1,496)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	15.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	15.7
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	15.69
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	15.65
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	17	15.64
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	15.63
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	15.62
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	15.62
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	15.6
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	15.56
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	15.55
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	15.54
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	15.53
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	15.52
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	15.5
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	15.48
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	15.46
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	15.45
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	15.44
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	15.43
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	15.42
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	15.41
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	15.4
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	13	15.4
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	15.38
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	15.38
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	15.38
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	15.38
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	15.36
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	15.33
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	15.29
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	15.29
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	15.28
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	15.26
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	15.25
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	15.25
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	15.25
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	15.24
(1,334)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	15.23
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	15.22
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	19	15.22
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	15.2
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	15.2
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	15.19
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	15.19
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	15.17
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	15.16
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	8	15.14
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	15.14
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	15.12
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	15.12
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	15.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	15.1
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	15.09
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	15.09
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	15.07
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	15.07
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	8	15.06
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	15.05
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	15.03
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	15.03
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	15.02
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	15.02
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	15.0
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	15.0
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	15.0
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	15.0
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	14.96
(1,252)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	14.93
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	14.92
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	14.91
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	14.9
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	14.89
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	14.89
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	14.86
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	14.86
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	14.85
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	14.81
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	14.81
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	14.8
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	14.78
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	14.78
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	14.76
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	14.76
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	14.74
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	14.73
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	14.73
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	14.72
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	14.72
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	14.71
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	14.7
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	14.7
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	14.67
(1,101)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	14.66
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	14.65
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	14.63
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	14.62
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	14.61
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	14.6
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	14.59
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	18	14.59
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	14.56
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	14.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	14.54
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	14.54
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	14.53
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	14.53
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	14.52
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	14.52
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	14.52
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	14.52
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	14.51
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	14.51
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	14.51
(1,332)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	14.5
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	14.49
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	14.49
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	14.49
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	14.48
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	14.46
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	14.44
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	14.44
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	14.44
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	14.4
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	14.39
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	14.39
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	14.38
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	14.37
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	14.36
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	14.35
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	19	14.34
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	14.29
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	14.29
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	14.27
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	14.27
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	14.25
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	14.25
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	14.24
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	14.22
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	14.22
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	14.21
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	14.2
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	14.19
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	14.17
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	14.16
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	14.16
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	14.15
(1,336)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	14.13
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	4	14.13
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	14.12
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	14.09
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	14.09
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	14.07
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	14.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	14.06
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	14.04
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	14.04
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	14.02
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	14.02
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	14.02
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	11	14.01
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	14.0
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	14.0
(1,268)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	13.96
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	13.95
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	13.93
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	13.92
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	13	13.92
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	13.92
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	13.9
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	13.87
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	13.86
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	13.86
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	13.85
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	13.84
(1,471)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	13.84
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	13.84
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	13.84
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	13.83
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	13.83
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	13.83
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	12	13.81
(1,543)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	16	13.8
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	13.79
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	13.79
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	13.79
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	13.78
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	13.78
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	13.74
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	13.72
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	13.67
(1,148)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1	13.67
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	13.65
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	13.62
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	13.6
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	13.6
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	5	13.59
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	13.59
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	13.59
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	13.56
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	13.56
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	13.56
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	13.54
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	13.53
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	13.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	13.52
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	13.48
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	13.42
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	13.42
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	13.42
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	13.41
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	13.38
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	13.38
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	13.38
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	13.37
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	13.37
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	13.36
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	13.36
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	13.35
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	13.35
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	13.35
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	13.33
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	13.33
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	13.32
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	13.31
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	13.31
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	13.3
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	13.28
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	13.28
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	13.28
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	13.25
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	13.25
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	17	13.24
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	13.24
(1,17)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	13.24
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	13.23
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	18	13.2
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	13.2
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	13.19
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	13.18
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	13.18
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	13.17
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	13.17
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	13.15
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	13.15
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	13.13
(1,292)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	13.13
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	13.13
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	13.12
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	13.11
(1,475)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	13.11
(1,251)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	13.11
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	13.11
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	13.1
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	13.1
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	13.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	13.05
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	13.04
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	13.03
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	13.01
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	13.0
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	12.98
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	12.98
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	12.98
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	12.98
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	12.96
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	12.92
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	12.89
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	12.88
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	12.86
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	12.86
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	12.85
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	12.83
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	18	12.82
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	12.82
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	12.81
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	12.81
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	12.8
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	12.79
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	12.76
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	13	12.75
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	12.75
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	12.75
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	12.75
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	12.72
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	12.72
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	12.72
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	12.71
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	12.71
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	12.7
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	12.7
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	12.69
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	12.66
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	12.65
(1,533)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	12.63
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	2	12.63
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	10	12.63
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	12.62
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	12.61
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	17	12.61
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	12.6
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	12.59
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	12.59
(1,19)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	12.59
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	12.57
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	12.55
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	8	12.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	12.55
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	12.54
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	12.53
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	12.53
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	12.52
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	12.51
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	12.51
(1,545)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	12.5
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	12.5
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	12.5
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	12.48
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	7	12.47
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	12.47
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	12.46
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	12.45
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	12.44
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	12.44
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	12.44
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	12.44
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	15	12.43
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	12.43
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	12.43
(1,395)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	12.41
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	12.41
(1,60)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	12.39
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	12.38
(1,367)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	12.36
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	12.35
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	12.34
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	12.34
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	12.34
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	12.32
(1,244)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	12.32
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	12.32
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	12.31
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	12.31
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	12.29
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	12.28
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	9	12.27
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	12.26
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	12.25
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	12.24
(1,508)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	12.21
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	12.21
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	12.21
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	12.2
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	12.2
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	11	12.19
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	12.18
(1,34)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	12.18
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	12.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	12.14
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	12.12
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	5	12.12
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	12.12
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	12.11
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	12.09
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	4	12.04
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	12.04
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	12.01
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	12.01
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	12.0
(1,470)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	12.0
(1,501)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	11.99
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	11.96
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	11.93
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	11.93
(1,58)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	11.93
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	11.92
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	11.92
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	16	11.91
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	11.91
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	2	11.91
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	11.89
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	11.89
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	11.85
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	11.84
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	11.84
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	11.83
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	11.81
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	11.8
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	11.79
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	11.79
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	11.79
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	11.79
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	11.78
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	11.78
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	11.76
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	13	11.75
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	11.74
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	11.71
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	11.7
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	11.69
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	11.68
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	11.68
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	11.67
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	11.65
(1,317)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	11.62
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	11.62
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	11.58
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	11.57
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	11.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	11.57
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	11.56
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	11.55
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	11.53
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	11.53
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	11.51
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	11.51
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	11.49
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	11.48
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	11.48
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	11.46
(1,259)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	11.46
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	11.44
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	11.44
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	11.41
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	11.39
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	11.35
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	11.34
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	11.33
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	11.33
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	11.33
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	5	11.33
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	11.32
(1,371)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	11.32
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	8	11.32
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	11.31
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	11.3
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	11.3
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	5	11.27
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	11.27
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	11	11.26
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	11.24
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	11.24
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	11.23
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	11.23
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	11.22
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	11.21
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	11.21
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	11.2
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	11.2
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	11.2
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	8	11.2
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	11.15
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	11.15
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	11.15
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	11.15
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	11.14
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	11.13
(1,102)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	11.13
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	11.13
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	11.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,371)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	11.08
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	11.08
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	9	11.07
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	5	11.07
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	9	11.06
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	11.05
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	11.04
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	11.04
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	11.04
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	11.04
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	16	11.03
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	11.02
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	11.02
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	11.01
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	11.01
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	4	10.99
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	10.98
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	10.97
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	10.94
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	10.92
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	10.92
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	10.9
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	11	10.89
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	10.89
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	10.89
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	10.88
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	10.87
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	10.87
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	10.83
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	10.83
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	10.83
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	10.82
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	10.81
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	10.78
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	2	10.76
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	10.74
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	10.74
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	10.74
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	10.72
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	10.72
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	10.72
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	10.71
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	10.7
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	10.69
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	10.68
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	15	10.68
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	10.66
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	10.65
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	10.64
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	10.64
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	10.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	10.6
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	10.59
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	10.58
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	5	10.57
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	8	10.56
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	10.55
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	10.53
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	19	10.49
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	10.49
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	10.47
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	10.47
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	10.47
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	10.46
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	10.45
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	10.42
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	10.41
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	10.4
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	10.39
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	10.38
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	8	10.37
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	10.37
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	10.36
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	10.36
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	10.34
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	18	10.34
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	10.33
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	10.32
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	10.31
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	10.3
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	10.3
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	10.26
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	10.26
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	10.25
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	10.23
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	12	10.22
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	10.21
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	10.2
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	10.2
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	10.19
(1,475)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	10.18
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	10.18
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	10.16
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	10.16
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	10.15
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	8	10.15
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	10.15
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	10.13
(1,516)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	10.12
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	12	10.11
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	10.09
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	15	10.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	10.07
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	10.07
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	10.05
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	10.04
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	10.02
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	10.01
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	10.0
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	10.0
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	11	10.0
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	9.99
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	9.98
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	9.97
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	9.96
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	9.96
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	9.95
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	9.93
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	9.93
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	9.93
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	9.93
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	9.92
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	9.92
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	9.91
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	9.91
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	15	9.89
(1,28)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	9.89
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	9.89
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	6	9.86
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	9.83
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	9.82
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	9.81
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	9.81
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	9.8
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	9.8
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	9.8
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	5	9.78
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	9.72
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	9.71
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	9.71
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	9.71
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	9.66
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	9.66
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	9.66
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	9.65
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	9.64
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	9.63
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	9.62
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	9.61
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	6	9.61
(1,175)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	9.59
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	9.54
(1,174)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	9.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	9.53
(1,228)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	9.52
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	9.52
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	9.51
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	9.51
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	9.5
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	12	9.48
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	3	9.47
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	9.46
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	9.46
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	9.45
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	9.43
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	9.43
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	9.43
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	9.42
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	9.42
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	9.41
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	9.41
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	9.41
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	3	9.4
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	9.39
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	9.39
(1,411)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	9.38
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	9.38
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	19	9.37
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	9.35
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	9.33
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	9.32
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	9.32
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	9.32
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	9.3
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	9.29
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	9.28
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	9.28
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	9.28
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	9.27
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	9.27
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	9.26
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	9.25
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	9.25
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	9.25
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	9.25
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	9.23
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	9.23
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	18	9.22
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	9.22
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	9.22
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	9.2
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	9.19
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	9.18
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	9.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,466)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	9.16
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	9.16
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	7	9.16
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	9.15
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	9.14
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	9.14
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	9.13
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	9.1
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	10	9.1
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	9.1
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	3	9.09
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	9.08
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	9.06
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	9.06
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	9.05
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	9.02
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	2	9.01
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	9.01
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	9.0
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	4	9.0
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	8.99
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	8.98
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	8.97
(1,187)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	8.97
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	8.97
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	8.96
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	8.92
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	8.92
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	17	8.91
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	8.91
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	8.91
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	8.9
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	8.89
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	12	8.88
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	8.88
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	8.88
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	8.87
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	8.86
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	8.86
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	8.86
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	8.85
(1,315)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	8.85
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	13	8.84
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	8.82
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	8.81
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	8.81
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	8.8
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	8.8
(1,441)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	16	8.79
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	8.79
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	8.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	8.78
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	8.78
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	8.77
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	8.76
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	8.76
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	8.75
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	8.74
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	8.74
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	8.74
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	8.74
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	8.74
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	8.73
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	8.72
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	8.71
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	19	8.7
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	8.7
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	8.7
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	8.69
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	8.68
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	8.68
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	8.66
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	8.65
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	8.64
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	8.63
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	8.63
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	8.62
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	8.62
(1,232)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	8.61
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	8.6
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	8.6
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	8.6
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	8.6
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	8.59
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	8.59
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	8.59
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	8.59
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	8.56
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1	8.55
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	13	8.55
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	8.54
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	8.53
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	8.53
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	8.53
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	18	8.52
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	8.5
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	8.49
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	8.48
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	8.47
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	8.45
(1,468)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	8.44
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	20	8.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	8.44
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	8.44
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	8.43
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	4	8.43
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	8.41
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	8.41
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	8.41
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	8.41
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	8.4
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	8.4
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	9	8.39
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	8.39
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	8.39
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	8.37
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	5	8.37
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	8.37
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	7	8.37
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	8.35
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	8.35
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	8.34
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	6	8.31
(1,213)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	8.3
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	8.3
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	8.3
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	8.28
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	8.28
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	8.27
(1,431)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	8.26
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	8.26
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	10	8.26
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	15	8.24
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	8.24
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	8.21
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	8.21
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	8.2
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	8.2
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	8.2
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	8.2
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	8.18
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	8.18
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	8.18
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	8.15
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	8.15
(1,489)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	8.13
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	17	8.12
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	8.12
(1,237)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	16	8.12
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	8.11
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	8.09
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	8.08
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	8.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	8.06
(1,221)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	8.06
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	8.05
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	8.04
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	8.03
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	8.02
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	9	8.02
(1,543)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	3	8.01
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	8.01
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	15	8.01
(1,437)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	7.99
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	7.99
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	7.99
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	7.99
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	7.98
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	20	7.98
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	7.98
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	7.97
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	7.95
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	7.95
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	7.95
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	7.94
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	2	7.93
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	7.93
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	11	7.93
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	7.92
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	7.92
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	7.92
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	7.92
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	7.92
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	7.9
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	7.9
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	7.9
(1,117)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	7.89
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	20	7.88
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	7.88
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	18	7.88
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	7.87
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	7.86
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	7.86
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	7.86
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	7.82
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	7.82
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	3	7.8
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	7.79
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	7.78
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	7.78
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	7.75
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	7.74
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	7.74
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	10	7.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	7.73
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	7.73
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	7.72
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	7.71
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	7.7
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	7.7
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	7.7
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	7.69
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	7.66
(1,18)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	7.66
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	7.64
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	7.64
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	7.64
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	7.63
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	7.63
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	7.63
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	7.62
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	7.62
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	7.61
(1,228)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	7.61
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	19	7.6
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	7.59
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	7.59
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	15	7.58
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	7.58
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	7.57
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	7.56
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	7.56
(1,426)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	7.56
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	6	7.56
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	7.56
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	7.56
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	7.54
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	7.54
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	7.54
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	7.54
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	6	7.53
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	7.53
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	7.52
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	7.52
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	7.5
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	7.5
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	7.49
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	7.48
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	7.47
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	7.47
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	7.47
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	7.46
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	7.45
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	7.44
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	7.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	7.43
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	7	7.43
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	7.42
(1,359)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	6	7.41
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	18	7.41
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	13	7.4
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	7.4
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	2	7.4
(1,419)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	7.39
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	7.39
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	7.39
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	7.38
(1,526)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	7.38
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	7.38
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	7.38
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	7.37
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	5	7.36
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	15	7.36
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	7.36
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	7.35
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	20	7.34
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	7.34
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	9	7.34
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	9	7.34
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	7.33
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	7.31
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	7.29
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	7.28
(1,141)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	7.27
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	13	7.26
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	7.25
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	7	7.25
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	7.25
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	7.24
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	7.2
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	7.19
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	7	7.19
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	15	7.19
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	7.19
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	14	7.19
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	7.18
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	7.16
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	7.15
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	7.15
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	7.15
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	7.14
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	7.14
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	7.11
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	7.11
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	7.1
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	7.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	7.09
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	7.08
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	7.07
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	7.06
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	7.05
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	7.04
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	7.03
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	7.02
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	12	7.02
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	7.01
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	6	7.0
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	6.99
(1,59)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	13	6.99
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	6.97
(1,313)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	6.97
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	6.97
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	6.96
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	6.95
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	5	6.95
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	6.93
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	6.93
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	6.93
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1	6.91
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	6.91
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	15	6.9
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	6.89
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	6.89
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	6.88
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	6.88
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	6.87
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	6.87
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	6.87
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	6.87
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	6.86
(1,12)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	6.86
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	6.84
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	6.83
(1,279)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	15	6.82
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	6.82
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	6.82
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	19	6.81
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	6.81
(1,37)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	6.81
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	17	6.8
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	6.8
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	6.8
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	6.79
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	6.79
(1,228)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	6.78
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	6.77
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	6.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,431)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	11	6.76
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	6.74
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	6.74
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	6.73
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	6.73
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	11	6.73
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	6.72
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	14	6.71
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	6.7
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	6.7
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	6.69
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	6.69
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	6.68
(1,183)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	6.67
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	6.66
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	6.66
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	6.65
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	19	6.64
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	6.64
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	6.62
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	18	6.62
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	6.62
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	6.62
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	6	6.61
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	5	6.6
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	6.6
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	15	6.59
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	6.59
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	6.57
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	13	6.57
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	6.57
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	6.56
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	2	6.56
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	6.54
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	13	6.54
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	6.53
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	6.53
(1,312)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	6.52
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	6.52
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	6.52
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	6.51
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	6.5
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	8	6.5
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	11	6.49
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	2	6.49
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	6.49
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	6.47
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	6.46
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	6.46
(1,302)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	6.45
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	6.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	6.45
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	8	6.44
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	6.44
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	6.43
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	6.43
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	6.43
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	6.43
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	6.43
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	6.42
(1,498)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	6.41
(1,472)	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	6.41
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	6.4
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	6.38
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	6.37
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	6.37
(1,1)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	8	6.37
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	6.35
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	8	6.34
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	6.34
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	6.34
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	6.34
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	6.34
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	6.33
(1,279)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	6.32
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	6.32
(1,339)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	6.3
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	6.3
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	6.3
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	6.3
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	6.29
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	6.29
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	6.29
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	6.28
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	6.28
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	13	6.28
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	20	6.27
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	6.27
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	6.27
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	17	6.26
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	6.26
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	6.25
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	6.24
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	6.24
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	6.23
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	6.23
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	6.23
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	6.23
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	6.22
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	6.21
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	6.21
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	6.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	6.19
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	6.18
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	6.17
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	20	6.17
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	5	6.17
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	18	6.16
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	6.16
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	6.16
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	6.15
(1,71)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	14	6.15
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	6.14
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	6.13
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	6.13
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	6.13
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	6.12
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	6.12
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	6.12
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	8	6.09
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	3	6.09
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	6.09
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	6.09
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	6.09
(1,248)	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	6.08
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	6.08
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	6.07
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	18	6.05
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	6.04
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	2	6.02
(1,359)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	15	6.02
(1,323)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	3	6.02
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	6.01
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	6.01
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	9	6.0
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	6.0
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	9	5.99
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	15	5.99
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1	5.97
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	5.97
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	5.96
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	14	5.95
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	17	5.94
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	5.93
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	5.92
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	19	5.92
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	5.91
(1,521)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	5.91
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	5.91
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	5.91
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	5.89
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	5.89
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	5.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	5.88
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	16	5.88
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	5.88
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	5.88
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	5.88
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	4	5.87
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	5.86
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	5.86
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	5.86
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	5.85
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	2	5.84
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	5.84
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	5.83
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	19	5.82
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	5.81
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	5.81
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	5.81
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	5.81
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	5.79
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	5.78
(1,468)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	5.77
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	5.77
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	2	5.77
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	5.77
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	5.76
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	5.75
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	10	5.74
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	5.74
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	5.74
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	5.73
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	12	5.73
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	5.72
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	5.72
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	5.72
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	13	5.7
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	5.7
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	5.69
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	6	5.69
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	5.69
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	5.68
(1,412)	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	5.67
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	5.67
(1,298)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	5.67
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	5.67
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	5.65
(1,430)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	5.63
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	13	5.63
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	7	5.61
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	5.59
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	5.59
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	2	5.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	5	5.57
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	5.57
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	5.57
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	5.56
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	5.56
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	8	5.55
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	5.54
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1	5.54
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	5.54
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	5.54
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	5.53
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	5.52
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	5.51
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	12	5.51
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	4	5.51
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	5.5
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	5.5
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	5.49
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	5.49
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	5.48
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	5.48
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	5.48
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	5.48
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	5.47
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	5.47
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	5.47
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	5.47
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	15	5.46
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	5.44
(2,20)	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	6	5.43
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	5.43
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	5.43
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	19	5.42
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	10	5.42
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	5	5.41
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	8	5.41
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	5.41
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	5.4
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	11	5.4
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	5.4
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	5.4
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	5.39
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	5.39
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	5.38
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	5.38
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	5.38
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	5.37
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	5.36
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	5.35
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	5.35
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	5.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	5.32
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	5.32
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	5.31
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	5.29
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	5.28
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	5.28
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	5.28
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	2	5.28
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	7	5.28
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1	5.28
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	5.27
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	5.27
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	5.27
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	2	5.26
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	5.26
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	5.26
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	5.24
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	5.24
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	6	5.24
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	5.23
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	5.22
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	5.22
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	5.21
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	5.21
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	5.2
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	5.2
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	5.19
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	5.18
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	5.17
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	5.17
(1,184)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1	5.17
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	5.17
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	5.16
(1,283)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	14	5.15
(1,211)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	5.15
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	5.15
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	5.15
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	5.14
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	5.14
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	5.14
(1,388)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	5.12
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	5.11
(1,233)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	5.1
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	5.1
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	5.09
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	7	5.09
(1,359)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	13	5.08
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	15	5.08
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	5.08
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	5.08
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	17	5.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	5.07
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	5.07
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	5.07
(1,142)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	4	5.06
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	5.06
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	5.06
(1,97)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	5.05
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	5.04
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	6	5.03
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	5.03
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	5.03
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	5.03
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	11	5.02
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	14	5.02
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	5.02
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	9	5.01
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	5.0
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	4.99
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	4.99
(1,218)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	4.99
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	4.98
(1,556)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	4.97
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	4.97
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	4.97
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	4.96
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	4.96
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	4.96
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	11	4.95
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	4.94
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	4.93
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	12	4.93
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	4.93
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	3	4.93
(1,492)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	12	4.92
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	2	4.92
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	4.91
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	4.91
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	20	4.9
(1,323)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	4.9
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	4.9
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	4.9
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	4.9
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	4.89
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	4.89
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	5	4.88
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	4.88
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	4.86
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	6	4.86
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	4.85
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	13	4.85
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	4.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	4.83
(1,464)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	6	4.82
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	5	4.82
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	4.82
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	4.82
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	4.81
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	4.8
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	4	4.79
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	4.79
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	4.79
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	19	4.78
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	19	4.77
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	4.77
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	4.77
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	20	4.76
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	4.76
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	4.74
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	4.74
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	4.73
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	4.73
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	15	4.72
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	4.72
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	4.71
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	4.71
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	6	4.71
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	4.7
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	4.69
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	4.68
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	4.68
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	4.68
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	4.68
(1,171)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	4.67
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	4.67
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	4.66
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	2	4.66
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	4.65
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	4.64
(1,5)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	4.63
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	12	4.62
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	10	4.62
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	3	4.62
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	4.61
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	4.59
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	2	4.59
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	4.59
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	4.58
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	20	4.58
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	4.58
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	4.58
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	4.58
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	6	4.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	4.57
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	10	4.56
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	20	4.56
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	14	4.55
(1,228)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	4.54
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	4.54
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	4.54
(1,2)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	4.54
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	19	4.53
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	4.53
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	4.52
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	4.52
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	8	4.52
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	14	4.51
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	4.51
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	4.51
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	8	4.5
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	3	4.5
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	4.5
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	4.5
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	4.5
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	4.49
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	18	4.48
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	4.48
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	4.48
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	4.47
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	4.47
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	4.47
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	3	4.46
(1,520)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	4.44
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	11	4.43
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	1	4.43
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	4.42
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	4.42
(1,312)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	4.41
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	4.41
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	4.4
(1,437)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	4.39
(1,233)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	4.39
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	4.39
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	4.39
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	4.39
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	4.38
(1,555)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	6	4.37
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	4.37
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	4.36
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	4.36
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	4.36
(1,193)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	4.35
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	4.35
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	3	4.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	4.34
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	2	4.33
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	4.33
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	4.33
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	4.33
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	4.32
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	4.3
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	4.3
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	4.29
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	4.28
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	4.27
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	9	4.26
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	18	4.26
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	4.26
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	3	4.25
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	17	4.25
(1,500)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	4.24
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	4.24
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	8	4.23
(1,282)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	16	4.23
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	17	4.22
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	4.22
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	6	4.19
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	11	4.18
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	4.18
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	4.17
(1,228)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	4.17
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	4.17
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	4.16
(1,83)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	20	4.16
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	4.16
(1,519)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1	4.15
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	4.15
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	4.15
(1,27)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	4.15
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	11	4.12
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	5	4.12
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	7	4.12
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	4.1
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	4.09
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	4.09
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	4.08
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	17	4.07
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	4.07
(1,267)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	2	4.06
(1,123)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	4.06
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	4.06
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	4.04
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	4.04
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	4.04
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	4.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	4.03
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	19	4.02
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	4.02
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	4.02
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	4.01
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	3.99
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	16	3.98
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	3.97
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	17	3.95
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	3.95
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	3.94
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	3.93
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	3.93
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	3.93
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	3.92
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	12	3.92
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	3.91
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	3	3.9
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	3.9
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	10	3.89
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	13	3.89
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	6	3.88
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	3.88
(1,493)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	3.87
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	3.87
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	3.84
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	3.84
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	3.83
(1,527)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	12	3.83
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	3.83
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	11	3.83
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	3.83
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	8	3.83
(1,488)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	3.82
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	3.82
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	3.82
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	3.81
(1,431)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	3.81
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	13	3.81
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	6	3.8
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	3.8
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	3.79
(1,539)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	3.79
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	3.79
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	3.78
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	3.77
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	17	3.75
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	14	3.75
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	3.75
(1,178)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	3.75
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	3.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	3.74
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	12	3.73
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	2	3.72
(1,87)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	3.72
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	5	3.71
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	3.7
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	3.7
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	3.7
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	3.68
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	3.68
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	3.68
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	3.67
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	4	3.67
(1,100)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	3.67
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	3.66
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	3.65
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	3.64
(1,96)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	3.63
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	3.62
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	3.62
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	3.62
(1,521)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	3.61
(1,482)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	10	3.61
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	3.61
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	3.61
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	3.6
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	3.6
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	3.59
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	3.59
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	3.59
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	3.59
(1,88)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	3.59
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	6	3.58
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	3.58
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	6	3.58
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	3.58
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	3.57
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	14	3.56
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	3.55
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	3.55
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	5	3.54
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	20	3.54
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	3.54
(1,9)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	3.53
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	13	3.51
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	20	3.5
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	9	3.5
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	12	3.5
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	3.5
(1,99)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	3.5
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	3.49
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	19	3.49
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	3.49
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	3.49
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	20	3.49
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	3.49
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	4	3.48
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	3.48
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	3.48
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	9	3.47
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	14	3.47
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	9	3.47
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1	3.46
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	15	3.46
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	3.45
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	3.45
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	6	3.44
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	3.43
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	3.42
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	3.41
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	3.41
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	3.41
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	3.41
(1,197)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	3.4
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	17	3.39
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	18	3.39
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	11	3.39
(1,152)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	3.38
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	3	3.38
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	4	3.37
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	3	3.36
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	3.36
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	3.36
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	3.36
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	3.35
(1,230)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	6	3.35
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	7	3.34
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	6	3.34
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	3.34
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	3.34
(2,20)	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	16	3.33
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	3.33
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	3.33
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	3.33
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	3.31
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	7	3.31
(1,437)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	14	3.3
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	3.29
(1,76)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	3.29
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	3.28
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	3.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	7	3.27
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	12	3.27
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	3.27
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	2	3.26
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	3.26
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	13	3.25
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	17	3.25
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	3.25
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	7	3.24
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	18	3.24
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	3.23
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	3.23
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	3.23
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	3.23
(1,15)	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	3.23
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	16	3.22
(1,334)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	19	3.22
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1	3.22
(1,32)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	3.22
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	3.22
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	3.21
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	3.21
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	3.21
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	13	3.2
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	3.2
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	10	3.2
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	12	3.19
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	16	3.19
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	3.18
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	13	3.17
(1,233)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	3.16
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	14	3.16
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	3.15
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	6	3.14
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	9	3.14
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	3.13
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	3.12
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	3.12
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	10	3.12
(1,559)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	16	3.11
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	3.1
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	15	3.1
(1,26)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	3.1
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	3.1
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	4	3.09
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	3.09
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	3.09
(1,250)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	4	3.08
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	3.08
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	10	3.06
(1,359)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	9	3.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,172)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	7	3.06
(1,163)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1	3.06
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	3.06
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	18	3.05
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	3.04
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	15	3.03
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	5	3.02
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	3.02
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	19	3.01
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	3.01
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	3.01
(1,279)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	17	3.0
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	3.0
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	2.99
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	2.99
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	2.98
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	20	2.98
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	8	2.97
(1,555)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	7	2.97
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	15	2.97
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	10	2.97
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	2.97
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	15	2.96
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	2.96
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	2.95
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	14	2.95
(1,98)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	2.94
(1,233)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	16	2.93
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	9	2.93
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	3	2.93
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	18	2.91
(1,558)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	13	2.91
(1,540)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	20	2.91
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	2.91
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	2.91
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	2.91
(1,36)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	2.91
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	2.9
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	10	2.9
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	2.89
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	16	2.88
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	18	2.87
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	2.87
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	2	2.87
(2,19)	1:661:A:ASP:C	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	6	2.86
(1,163)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	2.86
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	2.86
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	2.86
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	2.86
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	16	2.85
(1,520)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	2.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	2.85
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	16	2.85
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	11	2.85
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	5	2.84
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	19	2.84
(1,42)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	2.84
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	2.83
(1,118)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1	2.82
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	2.82
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	2.8
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	9	2.79
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	2.79
(1,99)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	2.79
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	2.79
(2,20)	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	12	2.78
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	2.78
(1,46)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	2.78
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	2.77
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	2.77
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	2.76
(1,521)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	2.76
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	2.76
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	2.76
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	2.76
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	2.76
(1,438)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	2.75
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	3	2.75
(1,306)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	5	2.75
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	2.74
(1,520)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	2.73
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	7	2.73
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	18	2.73
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	8	2.73
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	1	2.73
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	20	2.72
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	2	2.72
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	16	2.71
(1,228)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	10	2.71
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	3	2.71
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	6	2.7
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	7	2.69
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	2.69
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	17	2.68
(1,345)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	2.68
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	2.68
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	2.67
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	2.66
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	2.65
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	2.65
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	11	2.65
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	5	2.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,239)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	8	2.63
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	2.63
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	16	2.62
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	13	2.62
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	2.62
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	14	2.61
(1,99)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	5	2.61
(2,20)	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	18	2.6
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	11	2.6
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	7	2.6
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	18	2.6
(1,99)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	2.6
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	18	2.59
(1,233)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	2.59
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	2.59
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	11	2.59
(1,349)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	2.58
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	9	2.58
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	3	2.58
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	9	2.58
(1,529)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	2	2.57
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	17	2.57
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	8	2.56
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	20	2.56
(1,539)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	2.55
(1,539)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	2.55
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	2.55
(1,371)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	11	2.55
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	2.55
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	2.55
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	4	2.54
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	2.54
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	5	2.54
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	14	2.54
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	2.54
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	10	2.53
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	4	2.53
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	1	2.52
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	2.52
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	7	2.52
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	2.52
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	9	2.51
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	8	2.5
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	5	2.5
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	19	2.5
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	2.49
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	2.49
(1,441)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	17	2.48
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	9	2.47
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	2.47
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	2.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	16	2.46
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	3	2.46
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	2.46
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	8	2.46
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	11	2.45
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	2.44
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	2.44
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	2.44
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	18	2.44
(2,6)	1:634:A:TRP:N	1:634:A:TRP:CA	1:634:A:TRP:C	1:635:A:LEU:N	16	2.42
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	6	2.42
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	12	2.42
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	2.42
(1,99)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	2.42
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	20	2.42
(1,563)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	2.41
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	12	2.4
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	2.4
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	19	2.4
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	20	2.4
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	15	2.4
(1,8)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	2.4
(1,478)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	2.38
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	2.38
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	19	2.38
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	2.38
(1,547)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	2.37
(1,493)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	2.37
(1,272)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1	2.37
(1,440)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	2.36
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	11	2.36
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	11	2.36
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	2.35
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	9	2.34
(1,163)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	6	2.34
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	2	2.33
(1,475)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	2.33
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	7	2.33
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	2.33
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	5	2.33
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	15	2.33
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	2.33
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	3	2.32
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	2.31
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	2.3
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	12	2.3
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	18	2.29
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	2.28
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	11	2.28
(1,362)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	2.27
(1,350)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	2.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	13	2.25
(1,133)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	2.25
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	2.25
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	2	2.25
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	5	2.24
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	2.24
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	7	2.24
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	18	2.23
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	9	2.23
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	3	2.23
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	2.23
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	2.23
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	2.23
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	11	2.22
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	2.22
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	12	2.22
(2,6)	1:634:A:TRP:N	1:634:A:TRP:CA	1:634:A:TRP:C	1:635:A:LEU:N	6	2.21
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	6	2.21
(1,213)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	2.21
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	13	2.21
(1,517)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	1	2.2
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	2.19
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	2	2.17
(1,410)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	13	2.16
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	18	2.16
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	3	2.16
(1,258)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	2.15
(1,321)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	14	2.14
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	10	2.14
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	3	2.14
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	4	2.13
(1,41)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	2.13
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	2.12
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	2.11
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	9	2.11
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	2.11
(1,535)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	17	2.1
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	5	2.1
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	2.1
(2,51)	1:681:A:GLY:C	1:682:A:LEU:N	1:682:A:LEU:CA	1:682:A:LEU:C	14	2.09
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1	2.09
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	12	2.09
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	10	2.09
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	7	2.09
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	20	2.06
(1,398)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	2.06
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	9	2.05
(1,493)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	15	2.05
(1,199)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	17	2.05
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	6	2.03
(1,33)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	2.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,2)	1:629:A:ASP:N	1:629:A:ASP:CA	1:629:A:ASP:C	1:630:A:ARG:N	20	2.01
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	18	2.01
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	2.01
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	7	2.0
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	11	2.0
(2,20)	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	4	2.0
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	2.0
(1,323)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	13	2.0
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	12	2.0
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	2.0
(1,11)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	2.0
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	2.0
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	3	1.99
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	16	1.99
(1,337)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	18	1.99
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	20	1.99
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	16	1.99
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	16	1.99
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	7	1.98
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	1.97
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	18	1.97
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	1.96
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	1	1.95
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	1.95
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	19	1.94
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	3	1.94
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	1.94
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	8	1.94
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	6	1.94
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	18	1.93
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	17	1.93
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	17	1.93
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	10	1.92
(1,406)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	17	1.91
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	1.91
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	9	1.9
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	12	1.89
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	12	1.88
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	19	1.88
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	5	1.88
(1,521)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	15	1.87
(1,514)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	1.87
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	1.87
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	1	1.86
(1,146)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	1.86
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	2	1.86
(2,14)	1:638:A:LEU:N	1:638:A:LEU:CA	1:638:A:LEU:C	1:639:A:HIS:N	6	1.85
(1,333)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	7	1.85
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	13	1.85
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	15	1.84
(1,270)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	9	1.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	1.83
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	12	1.82
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	7	1.81
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	16	1.81
(1,163)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	9	1.81
(1,99)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	1.81
(1,514)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	1.8
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	12	1.8
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	10	1.79
(1,300)	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	1.79
(1,64)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	1.79
(2,14)	1:638:A:LEU:N	1:638:A:LEU:CA	1:638:A:LEU:C	1:639:A:HIS:N	14	1.78
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	1.77
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	8	1.77
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	15	1.76
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	8	1.76
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	15	1.76
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	6	1.76
(2,118)	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:CA	1:722:A:GLN:C	1:723:A:MET:N	4	1.75
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	15	1.75
(1,514)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	10	1.75
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	9	1.75
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	13	1.75
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	9	1.75
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	1.75
(1,513)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	1.74
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	2	1.74
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	19	1.74
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	19	1.73
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	10	1.73
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	1.73
(1,443)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1	1.72
(1,405)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	1.71
(1,273)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	4	1.7
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	11	1.7
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	12	1.68
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	9	1.68
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	8	1.67
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	8	1.66
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	1.65
(1,189)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	18	1.65
(1,125)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	1.65
(2,20)	1:662:A:GLU:N	1:662:A:GLU:CA	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	8	1.64
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	12	1.63
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	15	1.63
(1,490)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	4	1.62
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	3	1.62
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	6	1.61
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	1.61
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	1.61
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	13	1.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	1.59
(1,359)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	19	1.57
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	16	1.56
(1,343)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	1.56
(1,323)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	10	1.56
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	19	1.56
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	2	1.56
(1,198)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	14	1.56
(1,26)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	2	1.56
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	1.55
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	13	1.55
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	8	1.55
(1,558)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	8	1.54
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	1.54
(1,473)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	16	1.53
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	9	1.53
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	9	1.53
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	7	1.53
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	12	1.53
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	19	1.53
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	15	1.52
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	10	1.52
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	19	1.52
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	1.51
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	13	1.5
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	4	1.5
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	1.5
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	16	1.49
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	11	1.49
(1,13)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	1.49
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	11	1.48
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	1.48
(1,57)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	1.47
(2,51)	1:681:A:GLY:C	1:682:A:LEU:N	1:682:A:LEU:CA	1:682:A:LEU:C	10	1.46
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	7	1.46
(1,163)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	4	1.46
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	1	1.45
(1,385)	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	3	1.45
(1,98)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	14	1.45
(1,432)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	14	1.44
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	20	1.43
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	13	1.43
(1,255)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	1.43
(1,192)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	19	1.42
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	10	1.41
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	4	1.41
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	16	1.4
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	20	1.4
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	19	1.39
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	11	1.39
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,56)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:CA	1:687:A:GLN:C	1:688:A:ARG:N	1	1.38
(2,56)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:CA	1:687:A:GLN:C	1:688:A:ARG:N	7	1.38
(1,556)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	8	1.38
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	1.38
(1,493)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	9	1.38
(2,22)	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	20	1.37
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	1.37
(1,209)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	6	1.37
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	1.36
(2,21)	1:662:A:GLU:C	1:663:A:PRO:N	1:663:A:PRO:CA	1:663:A:PRO:C	13	1.35
(1,390)	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	6	1.34
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	16	1.34
(1,126)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	6	1.34
(1,26)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	1.34
(1,493)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	1.33
(1,131)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	5	1.33
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	14	1.33
(1,485)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	13	1.32
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	2	1.32
(1,512)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	20	1.31
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	8	1.31
(1,202)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	14	1.31
(1,35)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	16	1.31
(2,56)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:CA	1:687:A:GLN:C	1:688:A:ARG:N	2	1.3
(1,335)	1:670:A:ARG:N	1:670:A:ARG:H	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	19	1.3
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	14	1.3
(2,56)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:CA	1:687:A:GLN:C	1:688:A:ARG:N	19	1.29
(2,2)	1:629:A:ASP:N	1:629:A:ASP:CA	1:629:A:ASP:C	1:630:A:ARG:N	15	1.29
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	9	1.28
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	3	1.28
(2,2)	1:629:A:ASP:N	1:629:A:ASP:CA	1:629:A:ASP:C	1:630:A:ARG:N	13	1.27
(1,551)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	13	1.27
(1,539)	1:692:A:LEU:N	1:692:A:LEU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	1.27
(1,357)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	12	1.27
(1,153)	1:691:A:ASP:N	1:691:A:ASP:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	12	1.27
(1,378)	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	11	1.26
(1,209)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	14	1.26
(1,321)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	8	1.25
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	1.25
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	4	1.25
(1,553)	1:667:A:MET:N	1:667:A:MET:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	18	1.24
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	17	1.24
(1,301)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	14	1.24
(1,207)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	4	1.24
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	1.24
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	20	1.23
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	19	1.23
(1,186)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	2	1.23
(1,161)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	18	1.23
(1,127)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	7	1.23
(1,287)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	5	1.22
(1,4)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	9	1.22
(1,178)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	4	1.2
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	11	1.19
(1,393)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	4	1.19
(1,26)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	1.19
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	1	1.18
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	18	1.18
(2,14)	1:638:A:LEU:N	1:638:A:LEU:CA	1:638:A:LEU:C	1:639:A:HIS:N	19	1.17
(1,552)	1:672:A:ALA:N	1:672:A:ALA:H	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	15	1.17
(1,401)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	3	1.17
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	14	1.17
(1,84)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	14	1.17
(1,414)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:713:A:TYR:N	1:713:A:TYR:H	9	1.16
(1,334)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:H	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	4	1.16
(1,80)	1:689:A:SER:N	1:689:A:SER:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	15	1.15
(1,43)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	15	1.15
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	2	1.14
(1,294)	1:674:A:MET:N	1:674:A:MET:H	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	16	1.14
(1,94)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	4	1.14
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	7	1.13
(1,206)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	10	1.13
(1,14)	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	19	1.12
(1,264)	1:710:A:ASN:N	1:710:A:ASN:H	1:717:A:GLU:N	1:717:A:GLU:H	1	1.11
(1,233)	1:701:A:MET:N	1:701:A:MET:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	5	1.11
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	17	1.11
(1,52)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:708:A:LEU:N	1:708:A:LEU:H	2	1.11
(1,6)	1:690:A:GLY:N	1:690:A:GLY:H	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:H	1	1.11
(1,86)	1:703:A:ALA:N	1:703:A:ALA:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	16	1.1
(1,536)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	6	1.09
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	4	1.09
(2,56)	1:687:A:GLN:N	1:687:A:GLN:CA	1:687:A:GLN:C	1:688:A:ARG:N	18	1.08
(1,209)	1:693:A:TYR:N	1:693:A:TYR:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	20	1.08
(1,514)	1:688:A:ARG:N	1:688:A:ARG:H	1:719:A:ALA:N	1:719:A:ALA:H	6	1.07
(1,329)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	4	1.05
(1,223)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:712:A:TYR:N	1:712:A:TYR:H	19	1.05
(2,48)	1:676:A:PHE:N	1:676:A:PHE:CA	1:676:A:PHE:C	1:677:A:THR:N	11	1.04
(1,497)	1:698:A:GLU:N	1:698:A:GLU:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	7	1.04
(1,363)	1:699:A:ALA:N	1:699:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	13	1.04
(1,178)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	5	1.04
(2,23)	1:663:A:PRO:C	1:664:A:ARG:N	1:664:A:ARG:CA	1:664:A:ARG:C	4	1.03
(2,14)	1:638:A:LEU:N	1:638:A:LEU:CA	1:638:A:LEU:C	1:639:A:HIS:N	5	1.03
(1,351)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:709:A:ALA:N	1:709:A:ALA:H	11	1.03
(2,45)	1:674:A:MET:C	1:675:A:LEU:N	1:675:A:LEU:CA	1:675:A:LEU:C	18	1.02
(2,5)	1:633:A:ASP:C	1:634:A:TRP:N	1:634:A:TRP:CA	1:634:A:TRP:C	9	1.02
(2,2)	1:629:A:ASP:N	1:629:A:ASP:CA	1:629:A:ASP:C	1:630:A:ARG:N	17	1.02
(1,323)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:722:A:GLN:N	1:722:A:GLN:H	15	1.02
(1,178)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:715:A:LYS:N	1:715:A:LYS:H	2	1.02
(1,159)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:721:A:ALA:N	1:721:A:ALA:H	17	1.02
(1,3)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:700:A:ALA:N	1:700:A:ALA:H	5	1.02
(2,52)	1:682:A:LEU:N	1:682:A:LEU:CA	1:682:A:LEU:C	1:683:A:GLU:N	11	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,18)	1:640:A:TRP:N	1:640:A:TRP:CA	1:640:A:TRP:C	1:641:A:TYR:N	20	1.01
(1,564)	1:695:A:GLN:N	1:695:A:GLN:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	8	1.01
(1,146)	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	12	1.01
(1,493)	1:696:A:ALA:N	1:696:A:ALA:H	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:H	4	1.0
(1,348)	1:677:A:THR:N	1:677:A:THR:H	1:702:A:GLU:N	1:702:A:GLU:H	5	1.0
(1,106)	1:669:A:ALA:N	1:669:A:ALA:H	1:720:A:TRP:N	1:720:A:TRP:H	17	1.0
(1,98)	1:694:A:THR:N	1:694:A:THR:H	1:711:A:GLN:N	1:711:A:GLN:H	1	1.0