

TagDock: An efficient rigid body docking algorithm for oligomeric protein complex model construction and experiment planning

Jarrold A. Smith, Sarah J. Edwards, Christopher W. Moth, and Terry P. Lybrand

Supporting Information

Restraint Sets

Restraint sets used in TagDock processing of ZDOCK database.

A corresponds to M1, B to M2. Residue numberings are consistent with pdb.

The first two residues from A were chosen heuristically, the next two by DDM.

1A2K

A	32	CA	B	7	CA	50.15	1.0
A	32	CA	B	57	CA	51.8	1.0
A	32	CA	B	227	CA	42.26	1.0
A	110	CA	B	7	CA	23.96	1.0
A	110	CA	B	57	CA	39.03	1.0
A	110	CA	B	227	CA	33.12	1.0
A	203	CA	B	7	CA	51	1.0
A	203	CA	B	57	CA	68.81	1.0
A	203	CA	B	227	CA	45.13	1.0
A	72	CA	B	7	CA	24.34	1.0
A	72	CA	B	57	CA	37.34	1.0
A	72	CA	B	227	CA	15.79	1.0

1ACB

A	19	CA	B	166	CA	37.31	1.0
A	19	CA	B	244	CA	48.36	1.0
A	19	CA	B	157	CA	40.07	1.0
A	28	CA	B	166	CA	44.88	1.0
A	28	CA	B	244	CA	47.94	1.0
A	28	CA	B	157	CA	38.5	1.0
A	44	CA	B	157	CA	18.92	1.0
A	44	CA	B	166	CA	21.14	1.0
A	44	CA	B	244	CA	29.72	1.0
A	11	CA	B	157	CA	32.28	1.0
A	11	CA	B	166	CA	38.67	1.0
A	11	CA	B	244	CA	51.02	1.0

1AHW

A	65	CA	B	123	CA	76.03	1.0
A	65	CA	B	187	CA	87.17	1.0
A	65	CA	B	66	CA	37.32	1.0
A	78	CA	B	123	CA	83.68	1.0
A	78	CA	B	187	CA	97.39	1.0
A	78	CA	B	66	CA	62.61	1.0
A	211	CA	B	66	CA	36.19	1.0
A	211	CA	B	123	CA	75.5	1.0
A	211	CA	B	187	CA	82.48	1.0
A	149	CA	B	66	CA	17.43	1.0
A	149	CA	B	123	CA	64.18	1.0
A	149	CA	B	187	CA	73.09	1.0

1AK4

A	418	CA	B	31	CA	57.12	1.0
A	418	CA	B	40	CA	62.41	1.0
A	418	CA	B	144	CA	54.75	1.0
A	512	CA	B	31	CA	36.7	1.0
A	512	CA	B	40	CA	40.38	1.0
A	512	CA	B	144	CA	31.97	1.0

Restraint Sets

A	482	CA	B	31	CA	28.88	1.0
A	482	CA	B	40	CA	31.01	1.0
A	482	CA	B	144	CA	35.11	1.0
A	522	CA	B	31	CA	40.65	1.0
A	522	CA	B	40	CA	38.63	1.0
A	522	CA	B	144	CA	26.74	1.0

1AKJ

A	4	CA	B	51	CA	35.61	1.0
A	4	CA	B	148	CA	22.75	1.0
A	4	CA	B	194	CA	37	1.0
A	69	CA	B	51	CA	45.28	1.0
A	69	CA	B	148	CA	34.81	1.0
A	69	CA	B	194	CA	42.17	1.0
A	114	CA	B	51	CA	58.28	1.0
A	114	CA	B	148	CA	28.45	1.0
A	114	CA	B	194	CA	56.83	1.0
A	255	CA	B	51	CA	49.55	1.0
A	255	CA	B	148	CA	54.23	1.0
A	255	CA	B	194	CA	10.06	1.0

1ATN

A	54	CA	B	57	CA	23.96	1.0
A	54	CA	B	231	CA	48.44	1.0
A	54	CA	B	364	CA	55.76	1.0
A	157	CA	B	57	CA	28.45	1.0
A	157	CA	B	231	CA	68.17	1.0
A	157	CA	B	364	CA	55.32	1.0
A	228	CA	B	57	CA	44.26	1.0
A	228	CA	B	231	CA	71.56	1.0
A	228	CA	B	364	CA	77.67	1.0
A	75	CA	B	57	CA	20.4	1.0
A	75	CA	B	231	CA	41.78	1.0
A	75	CA	B	364	CA	58.78	1.0

1AVX

A	674	CA	B	170	CA	37.93	1.0
A	674	CA	B	236	CA	45.37	1.0
A	674	CA	B	82	CA	31.83	1.0
A	617	CA	B	170	CA	20.7	1.0
A	617	CA	B	236	CA	33.44	1.0
A	617	CA	B	82	CA	36.15	1.0
A	667	CA	B	82	CA	45.54	1.0
A	667	CA	B	170	CA	39.27	1.0
A	667	CA	B	236	CA	47.58	1.0
A	584	CA	B	82	CA	55.42	1.0
A	584	CA	B	170	CA	36.14	1.0
A	584	CA	B	236	CA	59.69	1.0

1AY7

A	22	CA	B	14	CA	30.59	1.0
A	22	CA	B	22	CA	34.67	1.0
A	22	CA	B	6	CA	33.85	1.0

Restraint Sets

A	62	CA	B	14	CA	41.96	1.0
A	62	CA	B	22	CA	42.19	1.0
A	62	CA	B	6	CA	38.12	1.0
A	35	CA	B	6	CA	21.94	1.0
A	35	CA	B	14	CA	21.51	1.0
A	35	CA	B	22	CA	20.67	1.0
A	81	CA	B	6	CA	37.56	1.0
A	81	CA	B	14	CA	31.15	1.0
A	81	CA	B	22	CA	26.67	1.0

1AZS

A	91	CA	B	405	CA	66.75	1.0
A	91	CA	B	429	CA	59.89	1.0
A	91	CA	B	1650	CA	65.15	1.0
A	111	CA	B	405	CA	71.63	1.0
A	111	CA	B	429	CA	78.55	1.0
A	111	CA	B	1650	CA	58.88	1.0
A	354	CA	B	405	CA	63.53	1.0
A	354	CA	B	429	CA	57.41	1.0
A	354	CA	B	1650	CA	48.62	1.0
A	329	CA	B	405	CA	89.01	1.0
A	329	CA	B	429	CA	82.66	1.0
A	329	CA	B	1650	CA	75.05	1.0

1B6C

A	196	CA	B	41	CA	13.63	1.0
A	196	CA	B	58	CA	12.62	1.0
A	196	CA	B	106	CA	18.15	1.0
A	439	CA	B	41	CA	53.57	1.0
A	439	CA	B	58	CA	50.84	1.0
A	439	CA	B	106	CA	62.83	1.0
A	188	CA	B	41	CA	10.55	1.0
A	188	CA	B	58	CA	24.23	1.0
A	188	CA	B	106	CA	29.35	1.0
A	225	CA	B	41	CA	25.07	1.0
A	225	CA	B	58	CA	26.56	1.0
A	225	CA	B	106	CA	20.92	1.0

1BGX

A	232	CA	B	123	CA	76.5	1.0
A	232	CA	B	184	CA	90.1	1.0
A	232	CA	B	65	CA	73.73	1.0
A	267	CA	B	123	CA	87.23	1.0
A	267	CA	B	184	CA	93.29	1.0
A	267	CA	B	65	CA	80.85	1.0
A	797	CA	B	65	CA	45.99	1.0
A	797	CA	B	123	CA	92.6	1.0
A	797	CA	B	184	CA	99.65	1.0
A	492	CA	B	65	CA	29.49	1.0
A	492	CA	B	123	CA	43.32	1.0
A	492	CA	B	184	CA	53.24	1.0

1BJ1

Restraint Sets

A	37	CA	B	123	CA	97.13	1.0
A	37	CA	B	187	CA	108.02	1.0
A	37	CA	B	66	CA	58.31	1.0
A	218	CA	B	123	CA	98.92	1.0
A	218	CA	B	187	CA	111.06	1.0
A	218	CA	B	66	CA	65.22	1.0
A	288	CA	B	66	CA	23.82	1.0
A	288	CA	B	123	CA	56.49	1.0
A	288	CA	B	187	CA	65.34	1.0
A	241	CA	B	66	CA	25.31	1.0
A	241	CA	B	123	CA	73.53	1.0
A	241	CA	B	187	CA	81.79	1.0

1BKD

A	102	CA	B	632	CA	42.68	1.0
A	102	CA	B	725	CA	72.41	1.0
A	102	CA	B	1015	CA	15.84	1.0
A	128	CA	B	632	CA	40.32	1.0
A	128	CA	B	725	CA	72.95	1.0
A	128	CA	B	1015	CA	40.43	1.0
A	48	CA	B	632	CA	47.9	1.0
A	48	CA	B	725	CA	76.22	1.0
A	48	CA	B	1015	CA	48.03	1.0
A	31	CA	B	632	CA	21.28	1.0
A	31	CA	B	725	CA	47.54	1.0
A	31	CA	B	1015	CA	50.93	1.0

1BUH

A	27	CA	B	209	CA	20.81	1.0
A	27	CA	B	249	CA	45.2	1.0
A	27	CA	B	71	CA	41.02	1.0
A	41	CA	B	209	CA	24.52	1.0
A	41	CA	B	249	CA	45.71	1.0
A	41	CA	B	71	CA	57.16	1.0
A	15	CA	B	71	CA	57.15	1.0
A	15	CA	B	209	CA	19.49	1.0
A	15	CA	B	249	CA	22.29	1.0
A	35	CA	B	71	CA	45.15	1.0
A	35	CA	B	209	CA	16.14	1.0
A	35	CA	B	249	CA	41.04	1.0

1BVK

A	6	CA	B	66	CA	24.07	1.0
A	6	CA	B	12	CA	45.88	1.0
A	6	CA	B	271	CA	32.73	1.0
A	89	CA	B	66	CA	29.04	1.0
A	89	CA	B	12	CA	50.41	1.0
A	89	CA	B	271	CA	40.86	1.0
A	47	CA	B	12	CA	64.93	1.0
A	47	CA	B	66	CA	48.46	1.0
A	47	CA	B	271	CA	35.72	1.0
A	102	CA	B	12	CA	38.09	1.0
A	102	CA	B	66	CA	24.5	1.0

Restraint Sets

A 102 CA B 271 CA 25.83 1.0

1BVN

A 813 CA B 29 CA 44.55 1.0
 A 813 CA B 174 CA 42.71 1.0
 A 813 CA B 437 CA 39.01 1.0
 A 847 CA B 29 CA 51.09 1.0
 A 847 CA B 174 CA 39.04 1.0
 A 847 CA B 437 CA 46.98 1.0
 A 804 CA B 29 CA 59.98 1.0
 A 804 CA B 174 CA 47.48 1.0
 A 804 CA B 437 CA 58.41 1.0
 A 861 CA B 29 CA 38.5 1.0
 A 861 CA B 174 CA 29.23 1.0
 A 861 CA B 437 CA 51.6 1.0

1CGI

A 34 CA B 174 CA 23.44 1.0
 A 34 CA B 243 CA 36.05 1.0
 A 34 CA B 156 CA 23.61 1.0
 A 44 CA B 174 CA 25.31 1.0
 A 44 CA B 243 CA 49.13 1.0
 A 44 CA B 156 CA 30.98 1.0
 A 1 CA B 156 CA 44.13 1.0
 A 1 CA B 174 CA 44.55 1.0
 A 1 CA B 243 CA 53.83 1.0
 A 13 CA B 156 CA 26.61 1.0
 A 13 CA B 174 CA 9.58 1.0
 A 13 CA B 243 CA 33.38 1.0

1CLV

A 511 CA B 29 CA 43.38 1.0
 A 511 CA B 162 CA 31.9 1.0
 A 511 CA B 412 CA 54.43 1.0
 A 520 CA B 29 CA 46.54 1.0
 A 520 CA B 162 CA 41.74 1.0
 A 520 CA B 412 CA 43.02 1.0
 A 506 CA B 29 CA 36.33 1.0
 A 506 CA B 162 CA 29.2 1.0
 A 506 CA B 412 CA 42.92 1.0
 A 524 CA B 29 CA 36.47 1.0
 A 524 CA B 162 CA 35.63 1.0
 A 524 CA B 412 CA 42.63 1.0

1D6R

A 13 CA B 165 CA 18.57 1.0
 A 13 CA B 244 CA 35.16 1.0
 A 13 CA B 20 CA 25.8 1.0
 A 14 CA B 165 CA 20.01 1.0
 A 14 CA B 244 CA 33.06 1.0
 A 14 CA B 20 CA 23.76 1.0
 A 38 CA B 20 CA 40.76 1.0
 A 38 CA B 165 CA 30.16 1.0

Restraint Sets

A	38	CA	B	244	CA	37.81	1.0
A	63	CA	B	20	CA	37.88	1.0
A	63	CA	B	165	CA	31.22	1.0
A	63	CA	B	244	CA	53.71	1.0

1DE4

A	124	CA	B	56	CA	28.99	1.0
A	124	CA	B	150	CA	47.48	1.0
A	124	CA	B	193	CA	67.98	1.0
A	346	CA	B	56	CA	75	1.0
A	346	CA	B	150	CA	60.56	1.0
A	346	CA	B	193	CA	89.44	1.0
A	1326	CA	B	56	CA	70.47	1.0
A	1326	CA	B	150	CA	57.99	1.0
A	1326	CA	B	193	CA	112.55	1.0
A	638	CA	B	56	CA	44.76	1.0
A	638	CA	B	150	CA	8.83	1.0
A	638	CA	B	193	CA	65.4	1.0

1DFJ

A	21	CA	B	5	CA	39.35	1.0
A	21	CA	B	28	CA	26.79	1.0
A	21	CA	B	62	CA	56.23	1.0
A	209	CA	B	5	CA	53.23	1.0
A	209	CA	B	28	CA	35.7	1.0
A	209	CA	B	62	CA	54.75	1.0
A	364	CA	B	5	CA	43.44	1.0
A	364	CA	B	28	CA	42.13	1.0
A	364	CA	B	62	CA	48.63	1.0
A	191	CA	B	5	CA	59.41	1.0
A	191	CA	B	28	CA	38.7	1.0
A	191	CA	B	62	CA	66.23	1.0

1DQJ

A	5	CA	B	122	CA	82.87	1.0
A	5	CA	B	188	CA	82.72	1.0
A	5	CA	B	53	CA	24.42	1.0
A	14	CA	B	122	CA	69.6	1.0
A	14	CA	B	188	CA	69.62	1.0
A	14	CA	B	53	CA	12.54	1.0
A	67	CA	B	53	CA	25.06	1.0
A	67	CA	B	122	CA	74.38	1.0
A	67	CA	B	188	CA	80.32	1.0
A	117	CA	B	53	CA	32.53	1.0
A	117	CA	B	122	CA	78.42	1.0
A	117	CA	B	188	CA	77.03	1.0

1E4K

A	83	CA	B	315	CA	42.04	1.0
A	83	CA	B	419	CA	78.09	1.0
A	83	CA	B	774	CA	44.56	1.0
A	38	CA	B	315	CA	60.15	1.0
A	38	CA	B	419	CA	97.41	1.0

Restraint Sets

A	38	CA	B	774	CA	62.3	1.0
A	160	CA	B	315	CA	34.84	1.0
A	160	CA	B	419	CA	64	1.0
A	160	CA	B	774	CA	29.76	1.0
A	147	CA	B	315	CA	45.59	1.0
A	147	CA	B	419	CA	79.71	1.0
A	147	CA	B	774	CA	37.17	1.0

1E6E

A	61	CA	B	27	CA	32.48	1.0
A	61	CA	B	259	CA	39.77	1.0
A	61	CA	B	416	CA	63.69	1.0
A	72	CA	B	27	CA	34.13	1.0
A	72	CA	B	259	CA	21.86	1.0
A	72	CA	B	416	CA	56.6	1.0
A	37	CA	B	27	CA	12.46	1.0
A	37	CA	B	259	CA	50.05	1.0
A	37	CA	B	416	CA	43.11	1.0
A	112	CA	B	27	CA	20.67	1.0
A	112	CA	B	259	CA	43.64	1.0
A	112	CA	B	416	CA	45.22	1.0

1E6J

A	161	CA	B	120	CA	76.27	1.0
A	161	CA	B	182	CA	80.02	1.0
A	161	CA	B	65	CA	30.02	1.0
A	179	CA	B	120	CA	74.34	1.0
A	179	CA	B	182	CA	76.43	1.0
A	179	CA	B	65	CA	46.38	1.0
A	206	CA	B	65	CA	24.06	1.0
A	206	CA	B	120	CA	62.71	1.0
A	206	CA	B	182	CA	64.64	1.0
A	151	CA	B	65	CA	40.95	1.0
A	151	CA	B	120	CA	82.96	1.0
A	151	CA	B	182	CA	84.55	1.0

###

A	18	CA	B	25	CA	24.49	1.0
A	18	CA	B	131	CA	52.12	1.0
A	18	CA	B	177	CA	43.67	1.0
A	66	CA	B	25	CA	19.25	1.0
A	66	CA	B	131	CA	27.28	1.0
A	66	CA	B	177	CA	40.11	1.0
A	152	CA	B	25	CA	15.83	1.0
A	152	CA	B	131	CA	46.83	1.0
A	152	CA	B	177	CA	31.63	1.0
A	135	CA	B	25	CA	35.71	1.0
A	135	CA	B	131	CA	51.7	1.0
A	135	CA	B	177	CA	57.57	1.0

1EAW

A	48	CA	B	171	CA	37.85	1.0
A	48	CA	B	241	CA	38.9	1.0

Restraint Sets

A	48	CA	B	21	CA	33.95	1.0
A	54	CA	B	171	CA	38.5	1.0
A	54	CA	B	241	CA	41.95	1.0
A	54	CA	B	21	CA	41.84	1.0
A	13	CA	B	21	CA	24.57	1.0
A	13	CA	B	171	CA	14.51	1.0
A	13	CA	B	241	CA	28.3	1.0
A	26	CA	B	21	CA	38.78	1.0
A	26	CA	B	171	CA	36.38	1.0
A	26	CA	B	241	CA	50.2	1.0

1EER

A	10	CA	B	10	CA	34.56	1.0
A	10	CA	B	49	CA	20.9	1.0
A	10	CA	B	81	CA	51.49	1.0
A	320	CA	B	10	CA	32.12	1.0
A	320	CA	B	49	CA	58.18	1.0
A	320	CA	B	81	CA	41.36	1.0
A	361	CA	B	10	CA	26.02	1.0
A	361	CA	B	49	CA	37.19	1.0
A	361	CA	B	81	CA	23.19	1.0
A	386	CA	B	10	CA	24.72	1.0
A	386	CA	B	49	CA	42.7	1.0
A	386	CA	B	81	CA	15.24	1.0

1EFN

A	139	CA	B	105	CA	35.16	1.0
A	139	CA	B	117	CA	18.08	1.0
A	139	CA	B	197	CA	46.16	1.0
A	112	CA	B	105	CA	39.85	1.0
A	112	CA	B	117	CA	22.63	1.0
A	112	CA	B	197	CA	41.41	1.0
A	126	CA	B	105	CA	39.45	1.0
A	126	CA	B	117	CA	22.42	1.0
A	126	CA	B	197	CA	46.9	1.0
A	117	CA	B	105	CA	32.16	1.0
A	117	CA	B	117	CA	17.5	1.0
A	117	CA	B	197	CA	34.33	1.0

1EWY

A	26	CA	B	116	CA	27.92	1.0
A	26	CA	B	177	CA	44.96	1.0
A	26	CA	B	279	CA	29.09	1.0
A	31	CA	B	116	CA	27.35	1.0
A	31	CA	B	177	CA	50.75	1.0
A	31	CA	B	279	CA	34.24	1.0
A	69	CA	B	116	CA	27.54	1.0
A	69	CA	B	177	CA	30.71	1.0
A	69	CA	B	279	CA	38.22	1.0
A	1	CA	B	116	CA	40.17	1.0
A	1	CA	B	177	CA	49.21	1.0
A	1	CA	B	279	CA	21.36	1.0

Restraint Sets

1EZU

A	62	CA	B	571	CA	24.94	1.0
A	62	CA	B	644	CA	24.83	1.0
A	62	CA	B	421	CA	42.24	1.0
A	47	CA	B	571	CA	51.78	1.0
A	47	CA	B	644	CA	49.55	1.0
A	47	CA	B	421	CA	73.73	1.0
A	479	CA	B	421	CA	30.42	1.0
A	479	CA	B	571	CA	13.58	1.0
A	479	CA	B	644	CA	41.88	1.0
A	451	CA	B	421	CA	25.46	1.0
A	451	CA	B	571	CA	20.53	1.0
A	451	CA	B	644	CA	31.31	1.0

1F34

A	35	CA	B	114	CA	53.66	1.0
A	35	CA	B	142	CA	26.34	1.0
A	35	CA	B	233	CA	64.83	1.0
A	50	CA	B	114	CA	39.91	1.0
A	50	CA	B	142	CA	16.02	1.0
A	50	CA	B	233	CA	60.04	1.0
A	138	CA	B	114	CA	23.74	1.0
A	138	CA	B	142	CA	36.74	1.0
A	138	CA	B	233	CA	21.38	1.0
A	116	CA	B	114	CA	17.7	1.0
A	116	CA	B	142	CA	37.66	1.0
A	116	CA	B	233	CA	29.81	1.0

1F51

A	1213	CA	B	44	CA	17.52	1.0
A	1213	CA	B	121	CA	21.9	1.0
A	1213	CA	B	524	CA	50.94	1.0
A	1246	CA	B	44	CA	29.91	1.0
A	1246	CA	B	121	CA	31.31	1.0
A	1246	CA	B	524	CA	66.84	1.0
A	1259	CA	B	44	CA	30.65	1.0
A	1259	CA	B	121	CA	13.9	1.0
A	1259	CA	B	524	CA	51.32	1.0
A	1287	CA	B	44	CA	28.08	1.0
A	1287	CA	B	121	CA	33.77	1.0
A	1287	CA	B	524	CA	40.15	1.0

1F6M

A	33	CA	B	122	CA	26.34	1.0
A	33	CA	B	196	CA	32.42	1.0
A	33	CA	B	5	CA	30	1.0
A	48	CA	B	122	CA	34.07	1.0
A	48	CA	B	196	CA	55.72	1.0
A	48	CA	B	5	CA	25.8	1.0
A	10	CA	B	5	CA	48.31	1.0
A	10	CA	B	122	CA	35.99	1.0
A	10	CA	B	196	CA	42.76	1.0
A	88	CA	B	5	CA	38.14	1.0

Restraint Sets

A	88	CA	B	122	CA	18.69	1.0
A	88	CA	B	196	CA	43.95	1.0

1FAK

A	104	CA	B	369	CA	30.26	1.0
A	104	CA	B	442	CA	54.21	1.0
A	104	CA	B	63	CA	21.77	1.0
A	78	CA	B	369	CA	21.43	1.0
A	78	CA	B	442	CA	34.34	1.0
A	78	CA	B	63	CA	35.17	1.0
A	138	CA	B	63	CA	22.8	1.0
A	138	CA	B	369	CA	42.4	1.0
A	138	CA	B	442	CA	50.59	1.0
A	206	CA	B	63	CA	11.18	1.0
A	206	CA	B	369	CA	50.88	1.0
A	206	CA	B	442	CA	72.89	1.0

1FC2

A	257	CA	B	135	CA	18.17	1.0
A	257	CA	B	145	CA	21.23	1.0
A	257	CA	B	154	CA	13.02	1.0
A	324	CA	B	135	CA	38.35	1.0
A	324	CA	B	145	CA	35.8	1.0
A	324	CA	B	154	CA	34.04	1.0
A	342	CA	B	135	CA	19.39	1.0
A	342	CA	B	145	CA	23.76	1.0
A	342	CA	B	154	CA	26.7	1.0
A	420	CA	B	135	CA	39.99	1.0
A	420	CA	B	145	CA	49.25	1.0
A	420	CA	B	154	CA	39.76	1.0

1FCC

A	13	CA	B	811	CA	70.57	1.0
A	13	CA	B	918	CA	46.41	1.0
A	13	CA	B	275	CA	44.74	1.0
A	17	CA	B	811	CA	64.43	1.0
A	17	CA	B	918	CA	46.47	1.0
A	17	CA	B	275	CA	42.43	1.0
A	26	CA	B	275	CA	36.03	1.0
A	26	CA	B	811	CA	56.04	1.0
A	26	CA	B	918	CA	42.22	1.0
A	41	CA	B	275	CA	35.3	1.0
A	41	CA	B	811	CA	60.12	1.0
A	41	CA	B	918	CA	39.75	1.0

1FFW

A	171	CA	B	15	CA	34.15	1.0
A	171	CA	B	27	CA	25.75	1.0
A	171	CA	B	74	CA	31.23	1.0
A	182	CA	B	15	CA	31.37	1.0
A	182	CA	B	27	CA	32.53	1.0
A	182	CA	B	74	CA	26.43	1.0
A	226	CA	B	15	CA	50.88	1.0

Restraint Sets

A	226	CA	B	27	CA	48.37	1.0
A	226	CA	B	74	CA	38.68	1.0
A	218	CA	B	15	CA	37.38	1.0
A	218	CA	B	27	CA	32.74	1.0
A	218	CA	B	74	CA	22.51	1.0

1FLE

A	22	CA	B	57	CA	11.1	1.0
A	22	CA	B	166	CA	21.97	1.0
A	22	CA	B	82	CA	29.27	1.0
A	45	CA	B	57	CA	17.58	1.0
A	45	CA	B	166	CA	31.18	1.0
A	45	CA	B	82	CA	37.02	1.0
A	27	CA	B	57	CA	11.21	1.0
A	27	CA	B	82	CA	23.3	1.0
A	27	CA	B	166	CA	32.39	1.0
A	11	CA	B	57	CA	28.63	1.0
A	11	CA	B	82	CA	46.29	1.0
A	11	CA	B	166	CA	42.07	1.0

1FQ1

A	57	CA	B	70	CA	54.78	1.0
A	57	CA	B	86	CA	32.63	1.0
A	57	CA	B	197	CA	55.02	1.0
A	101	CA	B	70	CA	59.36	1.0
A	101	CA	B	86	CA	49.84	1.0
A	101	CA	B	197	CA	57.18	1.0
A	232	CA	B	70	CA	47.37	1.0
A	232	CA	B	86	CA	34.87	1.0
A	232	CA	B	197	CA	24.08	1.0
A	161	CA	B	70	CA	25.49	1.0
A	161	CA	B	86	CA	12.04	1.0
A	161	CA	B	197	CA	31.24	1.0

1FQJ

A	337	CA	B	59	CA	42.42	1.0
A	337	CA	B	95	CA	43.19	1.0
A	337	CA	B	342	CA	57.71	1.0
A	367	CA	B	59	CA	36.88	1.0
A	367	CA	B	95	CA	32.44	1.0
A	367	CA	B	342	CA	41.15	1.0
A	408	CA	B	59	CA	22.35	1.0
A	408	CA	B	95	CA	52.8	1.0
A	408	CA	B	342	CA	34.89	1.0
A	358	CA	B	59	CA	41.76	1.0
A	358	CA	B	95	CA	46.45	1.0
A	358	CA	B	342	CA	36.46	1.0

1FSK

A	15	CA	B	184	CA	84.26	1.0
A	15	CA	B	495	CA	80.68	1.0
A	15	CA	B	359	CA	27.38	1.0
A	130	CA	B	184	CA	90.64	1.0

Restraint Sets

A	130	CA	B	495	CA	83.72	1.0
A	130	CA	B	359	CA	32.95	1.0
A	51	CA	B	184	CA	64.88	1.0
A	51	CA	B	359	CA	9.3	1.0
A	51	CA	B	495	CA	59.84	1.0
A	43	CA	B	184	CA	68.93	1.0
A	43	CA	B	359	CA	19.56	1.0
A	43	CA	B	495	CA	58.39	1.0

1GCQ

A	650	CA	B	205	CA	24.89	1.0
A	650	CA	B	186	CA	30.73	1.0
A	650	CA	B	211	CA	16.41	1.0
A	628	CA	B	205	CA	20.57	1.0
A	628	CA	B	186	CA	22.77	1.0
A	628	CA	B	211	CA	9.5	1.0
A	644	CA	B	186	CA	33.99	1.0
A	644	CA	B	205	CA	28.24	1.0
A	644	CA	B	211	CA	22.3	1.0
A	659	CA	B	186	CA	20.02	1.0
A	659	CA	B	205	CA	10.53	1.0
A	659	CA	B	211	CA	14.6	1.0

1GHQ

A	3	CA	B	4	CA	78.87	1.0
A	3	CA	B	64	CA	57.18	1.0
A	3	CA	B	211	CA	51.4	1.0
A	14	CA	B	4	CA	67.88	1.0
A	14	CA	B	64	CA	43.04	1.0
A	14	CA	B	211	CA	51.31	1.0
A	100	CA	B	4	CA	50.62	1.0
A	100	CA	B	64	CA	31.81	1.0
A	100	CA	B	211	CA	34.01	1.0
A	115	CA	B	4	CA	60.6	1.0
A	115	CA	B	64	CA	30.95	1.0
A	115	CA	B	211	CA	53.62	1.0

1GL1

A	27	CA	B	172	CA	8.98	1.0
A	27	CA	B	243	CA	35.31	1.0
A	27	CA	B	21	CA	26.38	1.0
A	28	CA	B	172	CA	12.2	1.0
A	28	CA	B	243	CA	33.36	1.0
A	28	CA	B	21	CA	24.97	1.0
A	2	CA	B	21	CA	30.16	1.0
A	2	CA	B	172	CA	17.75	1.0
A	2	CA	B	243	CA	46.1	1.0
A	7	CA	B	21	CA	36.39	1.0
A	7	CA	B	172	CA	11.75	1.0
A	7	CA	B	243	CA	40.3	1.0

1GLA

A	39	CA	B	65	CA	54.1	1.0
---	----	----	---	----	----	------	-----

Restraint Sets

A	39	CA	B	157	CA	62.7	1.0
A	39	CA	B	480	CA	11.84	1.0
A	129	CA	B	65	CA	71.36	1.0
A	129	CA	B	157	CA	75.37	1.0
A	129	CA	B	480	CA	19.79	1.0
A	110	CA	B	65	CA	57.03	1.0
A	110	CA	B	157	CA	78.22	1.0
A	110	CA	B	480	CA	26.89	1.0
A	19	CA	B	65	CA	65.09	1.0
A	19	CA	B	157	CA	87.2	1.0
A	19	CA	B	480	CA	36.9	1.0

1GP2

A	3	CA	B	63	CA	57.59	1.0
A	3	CA	B	99	CA	43.74	1.0
A	3	CA	B	214	CA	49.02	1.0
A	36	CA	B	63	CA	76.89	1.0
A	36	CA	B	99	CA	87.46	1.0
A	36	CA	B	214	CA	45.36	1.0
A	56	CA	B	63	CA	38.11	1.0
A	56	CA	B	99	CA	63.8	1.0
A	56	CA	B	214	CA	9.94	1.0
A	129	CA	B	63	CA	37.96	1.0
A	129	CA	B	99	CA	68.69	1.0
A	129	CA	B	214	CA	35.03	1.0

1GPW

A	55	CA	B	70	CA	27.25	1.0
A	55	CA	B	108	CA	34.66	1.0
A	55	CA	B	243	CA	44.52	1.0
A	75	CA	B	70	CA	34.93	1.0
A	75	CA	B	108	CA	55.79	1.0
A	75	CA	B	243	CA	49.65	1.0
A	135	CA	B	70	CA	23.56	1.0
A	135	CA	B	108	CA	42.02	1.0
A	135	CA	B	243	CA	17.93	1.0
A	116	CA	B	70	CA	31.46	1.0
A	116	CA	B	108	CA	28.91	1.0
A	116	CA	B	243	CA	28.77	1.0

1GRN

A	273	CA	B	103	CA	37.36	1.0
A	273	CA	B	131	CA	40.7	1.0
A	273	CA	B	50	CA	61.94	1.0
A	311	CA	B	103	CA	18.65	1.0
A	311	CA	B	131	CA	21.94	1.0
A	311	CA	B	50	CA	44.23	1.0
A	329	CA	B	50	CA	55.5	1.0
A	329	CA	B	103	CA	34.85	1.0
A	329	CA	B	131	CA	14.66	1.0
A	304	CA	B	50	CA	41.76	1.0
A	304	CA	B	103	CA	26.34	1.0
A	304	CA	B	131	CA	22.01	1.0

Restraint Sets

1GXD

A	14	CA	B	239	CA	76.46	1.0
A	14	CA	B	297	CA	110.39	1.0
A	14	CA	B	627	CA	35.77	1.0
A	153	CA	B	239	CA	58.93	1.0
A	153	CA	B	297	CA	88.33	1.0
A	153	CA	B	627	CA	17.22	1.0
A	79	CA	B	239	CA	84.7	1.0
A	79	CA	B	297	CA	118.03	1.0
A	79	CA	B	627	CA	53.87	1.0
A	182	CA	B	239	CA	55.27	1.0
A	182	CA	B	297	CA	93.75	1.0
A	182	CA	B	627	CA	33.84	1.0

1H1V

A	489	CA	B	59	CA	46.29	1.0
A	489	CA	B	232	CA	61.53	1.0
A	489	CA	B	360	CA	23.32	1.0
A	614	CA	B	59	CA	69.38	1.0
A	614	CA	B	232	CA	66.63	1.0
A	614	CA	B	360	CA	67.1	1.0
A	649	CA	B	59	CA	40.39	1.0
A	649	CA	B	232	CA	23.17	1.0
A	649	CA	B	360	CA	54.77	1.0
A	659	CA	B	59	CA	52.3	1.0
A	659	CA	B	232	CA	45.87	1.0
A	659	CA	B	360	CA	51.16	1.0

1H9D

A	16	CA	B	63	CA	21.26	1.0
A	16	CA	B	124	CA	30.43	1.0
A	16	CA	B	168	CA	24.73	1.0
A	37	CA	B	63	CA	38.23	1.0
A	37	CA	B	124	CA	33.53	1.0
A	37	CA	B	168	CA	26.19	1.0
A	92	CA	B	63	CA	45.17	1.0
A	92	CA	B	124	CA	39.65	1.0
A	92	CA	B	168	CA	39.58	1.0
A	2	CA	B	63	CA	15.71	1.0
A	2	CA	B	124	CA	16.45	1.0
A	2	CA	B	168	CA	31.32	1.0

1HCF

A	369	CA	B	37	CA	59.53	1.0
A	369	CA	B	124	CA	53.5	1.0
A	369	CA	B	308	CA	44.27	1.0
A	376	CA	B	37	CA	37.94	1.0
A	376	CA	B	124	CA	38.14	1.0
A	376	CA	B	308	CA	31.02	1.0
A	328	CA	B	37	CA	39.31	1.0
A	328	CA	B	124	CA	36.19	1.0
A	328	CA	B	308	CA	25.09	1.0

Restraint Sets

A	336	CA	B	37	CA	50.48	1.0
A	336	CA	B	124	CA	35.73	1.0
A	336	CA	B	308	CA	44.02	1.0

1HE1

A	104	CA	B	182	CA	32.28	1.0
A	104	CA	B	200	CA	49.08	1.0
A	104	CA	B	228	CA	27.66	1.0
A	131	CA	B	182	CA	27.56	1.0
A	131	CA	B	200	CA	21.68	1.0
A	131	CA	B	228	CA	43.64	1.0
A	36	CA	B	182	CA	13.78	1.0
A	36	CA	B	200	CA	34.21	1.0
A	36	CA	B	228	CA	17.34	1.0
A	43	CA	B	182	CA	30.98	1.0
A	43	CA	B	200	CA	49.92	1.0
A	43	CA	B	228	CA	38.77	1.0

1HE8

A	25	CA	B	145	CA	57.44	1.0
A	25	CA	B	250	CA	20.12	1.0
A	25	CA	B	403	CA	93.43	1.0
A	87	CA	B	145	CA	82.15	1.0
A	87	CA	B	250	CA	33.66	1.0
A	87	CA	B	403	CA	108.71	1.0
A	74	CA	B	145	CA	60.9	1.0
A	74	CA	B	250	CA	31.39	1.0
A	74	CA	B	403	CA	81.71	1.0
A	47	CA	B	145	CA	64.59	1.0
A	47	CA	B	250	CA	39.7	1.0
A	47	CA	B	403	CA	94.62	1.0

1HIA

A	35	CA	B	266	CA	33.67	1.0
A	35	CA	B	336	CA	36.74	1.0
A	35	CA	B	82	CA	24.6	1.0
A	16	CA	B	266	CA	20.25	1.0
A	16	CA	B	336	CA	35.77	1.0
A	16	CA	B	82	CA	41.02	1.0
A	8	CA	B	82	CA	53.34	1.0
A	8	CA	B	266	CA	30.41	1.0
A	8	CA	B	336	CA	46.82	1.0
A	19	CA	B	82	CA	48.77	1.0
A	19	CA	B	266	CA	19.86	1.0
A	19	CA	B	336	CA	41.2	1.0

1I2M

A	221	CA	B	72	CA	23.59	1.0
A	221	CA	B	136	CA	37.38	1.0
A	221	CA	B	169	CA	50.45	1.0
A	114	CA	B	72	CA	35.72	1.0
A	114	CA	B	136	CA	26.35	1.0
A	114	CA	B	169	CA	53.18	1.0

Restraint Sets

A	383	CA	B	72	CA	26.03	1.0
A	383	CA	B	136	CA	27.36	1.0
A	383	CA	B	169	CA	32.7	1.0
A	213	CA	B	72	CA	13.57	1.0
A	213	CA	B	136	CA	34.66	1.0
A	213	CA	B	169	CA	40.91	1.0

114D

A	25	CA	B	83	CA	42.11	1.0
A	25	CA	B	164	CA	62.19	1.0
A	25	CA	B	465	CA	60.62	1.0
A	131	CA	B	83	CA	45.52	1.0
A	131	CA	B	164	CA	86.93	1.0
A	131	CA	B	465	CA	44.51	1.0
A	66	CA	B	83	CA	26.9	1.0
A	66	CA	B	164	CA	71.33	1.0
A	66	CA	B	465	CA	63.99	1.0
A	178	CA	B	83	CA	55.67	1.0
A	178	CA	B	164	CA	43.59	1.0
A	178	CA	B	465	CA	81.39	1.0

119R

A	188	CA	B	154	CA	75.97	1.0
A	188	CA	B	454	CA	71.35	1.0
A	188	CA	B	778	CA	83.99	1.0
A	359	CA	B	154	CA	28.92	1.0
A	359	CA	B	454	CA	33.93	1.0
A	359	CA	B	778	CA	31.82	1.0
A	32	CA	B	154	CA	9.22	1.0
A	32	CA	B	454	CA	33.66	1.0
A	32	CA	B	778	CA	41.71	1.0
A	301	CA	B	154	CA	37.83	1.0
A	301	CA	B	454	CA	58.74	1.0
A	301	CA	B	778	CA	46.98	1.0

11B1

A	45	CA	B	137	CA	46.34	1.0
A	45	CA	B	204	CA	15.04	1.0
A	45	CA	B	459	CA	63.4	1.0
A	60	CA	B	137	CA	60.27	1.0
A	60	CA	B	204	CA	28.69	1.0
A	60	CA	B	459	CA	73.79	1.0
A	115	CA	B	137	CA	60.58	1.0
A	115	CA	B	204	CA	38.41	1.0
A	115	CA	B	459	CA	50.5	1.0
A	30	CA	B	137	CA	25.7	1.0
A	30	CA	B	204	CA	25.06	1.0
A	30	CA	B	459	CA	54.49	1.0

11BR

A	15	CA	B	32	CA	19.54	1.0
A	15	CA	B	95	CA	31.73	1.0
A	15	CA	B	169	CA	27.88	1.0

Restraint Sets

A	85	CA	B	32	CA	53.6	1.0
A	85	CA	B	95	CA	43	1.0
A	85	CA	B	169	CA	50.01	1.0
A	440	CA	B	32	CA	46.56	1.0
A	440	CA	B	95	CA	31.62	1.0
A	440	CA	B	169	CA	48.48	1.0
A	229	CA	B	32	CA	47.91	1.0
A	229	CA	B	95	CA	39.26	1.0
A	229	CA	B	169	CA	26.41	1.0

1IJK

A	529	CA	B	23	CA	50.87	1.0
A	529	CA	B	48	CA	42.26	1.0
A	529	CA	B	453	CA	50.87	1.0
A	574	CA	B	23	CA	57.25	1.0
A	574	CA	B	48	CA	43.68	1.0
A	574	CA	B	453	CA	66.31	1.0
A	670	CA	B	23	CA	32.47	1.0
A	670	CA	B	48	CA	14.46	1.0
A	670	CA	B	453	CA	56.48	1.0
A	629	CA	B	23	CA	26.96	1.0
A	629	CA	B	48	CA	28.64	1.0
A	629	CA	B	453	CA	30.35	1.0

1IQD

A	2176	CA	B	123	CA	90.43	1.0
A	2176	CA	B	185	CA	93.79	1.0
A	2176	CA	B	54	CA	36.56	1.0
A	2201	CA	B	123	CA	64	1.0
A	2201	CA	B	185	CA	64.77	1.0
A	2201	CA	B	54	CA	18.89	1.0
A	2225	CA	B	54	CA	12.46	1.0
A	2225	CA	B	123	CA	71.48	1.0
A	2225	CA	B	185	CA	73.23	1.0
A	2252	CA	B	54	CA	14.88	1.0
A	2252	CA	B	123	CA	58.35	1.0
A	2252	CA	B	185	CA	62.63	1.0

1IRA

A	12	CA	B	84	CA	38.76	1.0
A	12	CA	B	186	CA	46.05	1.0
A	12	CA	B	307	CA	39.68	1.0
A	104	CA	B	84	CA	44	1.0
A	104	CA	B	186	CA	44.51	1.0
A	104	CA	B	307	CA	40.34	1.0
A	37	CA	B	84	CA	32.08	1.0
A	37	CA	B	186	CA	28.61	1.0
A	37	CA	B	307	CA	60.57	1.0
A	73	CA	B	84	CA	28.78	1.0
A	73	CA	B	186	CA	50.62	1.0
A	73	CA	B	307	CA	55.04	1.0

1J2J

Restraint Sets

A	172	CA	B	39	CA	37.39	1.0
A	172	CA	B	100	CA	31.54	1.0
A	172	CA	B	178	CA	39.08	1.0
A	187	CA	B	39	CA	20.61	1.0
A	187	CA	B	100	CA	35.04	1.0
A	187	CA	B	178	CA	27.93	1.0
A	206	CA	B	39	CA	35.08	1.0
A	206	CA	B	100	CA	31.06	1.0
A	206	CA	B	178	CA	48.3	1.0
A	183	CA	B	39	CA	25.3	1.0
A	183	CA	B	100	CA	29.99	1.0
A	183	CA	B	178	CA	25.06	1.0

1JIW

A	11	CA	B	32	CA	35.63	1.0
A	11	CA	B	70	CA	33.79	1.0
A	11	CA	B	419	CA	67.99	1.0
A	18	CA	B	32	CA	37.6	1.0
A	18	CA	B	70	CA	47.7	1.0
A	18	CA	B	419	CA	64.02	1.0
A	37	CA	B	32	CA	34.17	1.0
A	37	CA	B	70	CA	45.99	1.0
A	37	CA	B	419	CA	52.72	1.0
A	66	CA	B	32	CA	23.73	1.0
A	66	CA	B	70	CA	31.08	1.0
A	66	CA	B	419	CA	61.15	1.0

1JK9

A	60	CA	B	20	CA	28.91	1.0
A	60	CA	B	182	CA	17.88	1.0
A	60	CA	B	162	CA	31.05	1.0
A	151	CA	B	20	CA	44.4	1.0
A	151	CA	B	182	CA	14.3	1.0
A	151	CA	B	162	CA	35.66	1.0
A	12	CA	B	20	CA	42.7	1.0
A	12	CA	B	162	CA	32.37	1.0
A	12	CA	B	182	CA	33.23	1.0
A	128	CA	B	20	CA	45.84	1.0
A	128	CA	B	162	CA	53.45	1.0
A	128	CA	B	182	CA	38.04	1.0

1JMO

A	126	CA	B	170	CA	75.71	1.0
A	126	CA	B	237	CA	92.25	1.0
A	126	CA	B	442	CA	30.21	1.0
A	171	CA	B	170	CA	66.76	1.0
A	171	CA	B	237	CA	78.62	1.0
A	171	CA	B	442	CA	14.42	1.0
A	37	CA	B	170	CA	40.99	1.0
A	37	CA	B	237	CA	52.97	1.0
A	37	CA	B	442	CA	24.03	1.0
A	312	CA	B	170	CA	80.56	1.0
A	312	CA	B	237	CA	82.3	1.0

Restraint Sets

A 312 CA B 442 CA 37.5 1.0

1JPS

A 105 CA B 122 CA 66.1 1.0
 A 105 CA B 184 CA 74.21 1.0
 A 105 CA B 66 CA 32.79 1.0
 A 78 CA B 122 CA 85.94 1.0
 A 78 CA B 184 CA 96.33 1.0
 A 78 CA B 66 CA 62.51 1.0
 A 138 CA B 66 CA 38.5 1.0
 A 138 CA B 122 CA 88.36 1.0
 A 138 CA B 184 CA 95.41 1.0
 A 180 CA B 66 CA 30.39 1.0
 A 180 CA B 122 CA 70.76 1.0
 A 180 CA B 184 CA 71.51 1.0

1JTG

A 6 CA B 85 CA 44.83 1.0
 A 6 CA B 111 CA 18.64 1.0
 A 6 CA B 286 CA 41.32 1.0
 A 18 CA B 85 CA 42.16 1.0
 A 18 CA B 111 CA 16.56 1.0
 A 18 CA B 286 CA 44.87 1.0
 A 94 CA B 85 CA 45.22 1.0
 A 94 CA B 111 CA 25.32 1.0
 A 94 CA B 286 CA 61.93 1.0
 A 48 CA B 85 CA 32.88 1.0
 A 48 CA B 111 CA 19.2 1.0
 A 48 CA B 286 CA 28.62 1.0

1JWH

A 130 CA B 68 CA 73.29 1.0
 A 130 CA B 170 CA 37.89 1.0
 A 130 CA B 231 CA 97.31 1.0
 A 252 CA B 68 CA 70.59 1.0
 A 252 CA B 170 CA 50.68 1.0
 A 252 CA B 231 CA 115.08 1.0
 A 18 CA B 68 CA 60 1.0
 A 18 CA B 170 CA 47.56 1.0
 A 18 CA B 231 CA 104.68 1.0
 A 59 CA B 68 CA 49.91 1.0
 A 59 CA B 170 CA 22.46 1.0
 A 59 CA B 231 CA 65.67 1.0

1JZD

A 16 CA B 1 CA 38.47 1.0
 A 16 CA B 113 CA 35.39 1.0
 A 16 CA B 413 CA 37.29 1.0
 A 24 CA B 1 CA 54.99 1.0
 A 24 CA B 113 CA 23.95 1.0
 A 24 CA B 413 CA 55.83 1.0
 A 93 CA B 1 CA 54.32 1.0
 A 93 CA B 113 CA 17.37 1.0

Restraint Sets

A	93	CA	B	413	CA	59.13	1.0
A	72	CA	B	1	CA	60.43	1.0
A	72	CA	B	113	CA	53.73	1.0
A	72	CA	B	413	CA	27.63	1.0

1K4C

A	24	CA	B	190	CA	88.12	1.0
A	24	CA	B	484	CA	101.23	1.0
A	24	CA	B	366	CA	53.38	1.0
A	62	CA	B	190	CA	57.95	1.0
A	62	CA	B	484	CA	69.12	1.0
A	62	CA	B	366	CA	22.97	1.0
A	55	CA	B	190	CA	60.94	1.0
A	55	CA	B	366	CA	24.43	1.0
A	55	CA	B	484	CA	64.55	1.0
A	78	CA	B	190	CA	71.05	1.0
A	78	CA	B	366	CA	23.94	1.0
A	78	CA	B	484	CA	82.24	1.0

1K5D

A	19	CA	B	32	CA	49.27	1.0
A	19	CA	B	141	CA	49.68	1.0
A	19	CA	B	196	CA	61.81	1.0
A	154	CA	B	32	CA	50.24	1.0
A	154	CA	B	141	CA	56.53	1.0
A	154	CA	B	196	CA	55.44	1.0
A	318	CA	B	32	CA	52.82	1.0
A	318	CA	B	141	CA	27.88	1.0
A	318	CA	B	196	CA	75.65	1.0
A	108	CA	B	32	CA	22.49	1.0
A	108	CA	B	141	CA	38.13	1.0
A	108	CA	B	196	CA	34.58	1.0

1K74

A	230	CA	B	339	CA	49.17	1.0
A	230	CA	B	407	CA	38.98	1.0
A	230	CA	B	1131	CA	48.15	1.0
A	257	CA	B	339	CA	58.32	1.0
A	257	CA	B	407	CA	63.05	1.0
A	257	CA	B	1131	CA	53.8	1.0
A	1195	CA	B	339	CA	39.25	1.0
A	1195	CA	B	407	CA	44.61	1.0
A	1195	CA	B	1131	CA	58.21	1.0
A	458	CA	B	339	CA	28.8	1.0
A	458	CA	B	407	CA	52.27	1.0
A	458	CA	B	1131	CA	35.86	1.0

1KAC

A	130	CA	B	429	CA	17.38	1.0
A	130	CA	B	407	CA	19.73	1.0
A	130	CA	B	542	CA	34.41	1.0
A	139	CA	B	429	CA	29.97	1.0
A	139	CA	B	407	CA	47.08	1.0

Restraint Sets

A	139	CA	B	542	CA	40.7	1.0
A	65	CA	B	407	CA	43.19	1.0
A	65	CA	B	429	CA	24	1.0
A	65	CA	B	542	CA	30.05	1.0
A	126	CA	B	407	CA	19.83	1.0
A	126	CA	B	429	CA	17.81	1.0
A	126	CA	B	542	CA	36	1.0

1KKL

A	52	CA	B	217	CA	22.85	1.0
A	52	CA	B	288	CA	35.84	1.0
A	52	CA	B	705	CA	60.66	1.0
A	70	CA	B	217	CA	41.23	1.0
A	70	CA	B	288	CA	43.08	1.0
A	70	CA	B	705	CA	63.06	1.0
A	11	CA	B	217	CA	36.72	1.0
A	11	CA	B	288	CA	53.27	1.0
A	11	CA	B	705	CA	67.38	1.0
A	30	CA	B	217	CA	36.05	1.0
A	30	CA	B	288	CA	39.12	1.0
A	30	CA	B	705	CA	54.9	1.0

1KLU

A	22	CA	B	50	CA	31.16	1.0
A	22	CA	B	76	CA	45.66	1.0
A	22	CA	B	336	CA	76.18	1.0
A	78	CA	B	50	CA	40.34	1.0
A	78	CA	B	76	CA	28.13	1.0
A	78	CA	B	336	CA	72.33	1.0
A	1	CA	B	50	CA	36.68	1.0
A	1	CA	B	76	CA	54.08	1.0
A	1	CA	B	336	CA	73.46	1.0
A	125	CA	B	50	CA	58.8	1.0
A	125	CA	B	76	CA	50.82	1.0
A	125	CA	B	336	CA	97.77	1.0

1KTZ

A	52	CA	B	28	CA	16.79	1.0
A	52	CA	B	96	CA	8.98	1.0
A	52	CA	B	111	CA	41.18	1.0
A	34	CA	B	28	CA	29.73	1.0
A	34	CA	B	96	CA	17.69	1.0
A	34	CA	B	111	CA	53.99	1.0
A	130	CA	B	28	CA	32.21	1.0
A	130	CA	B	96	CA	37.21	1.0
A	130	CA	B	111	CA	58.37	1.0
A	82	CA	B	28	CA	32.69	1.0
A	82	CA	B	96	CA	25.37	1.0
A	82	CA	B	111	CA	57.08	1.0

1KXP

A	83	CA	B	60	CA	88.47	1.0
A	83	CA	B	230	CA	79	1.0

Restraint Sets

A	83	CA	B	360	CA	67.7	1.0
A	195	CA	B	60	CA	41.45	1.0
A	195	CA	B	230	CA	43.39	1.0
A	195	CA	B	360	CA	34.83	1.0
A	322	CA	B	60	CA	58.44	1.0
A	322	CA	B	230	CA	58.17	1.0
A	322	CA	B	360	CA	45.97	1.0
A	435	CA	B	60	CA	58.73	1.0
A	435	CA	B	230	CA	34.55	1.0
A	435	CA	B	360	CA	66.77	1.0

1KXQ

A	68	CA	B	30	CA	48.7	1.0
A	68	CA	B	173	CA	35.11	1.0
A	68	CA	B	437	CA	61.89	1.0
A	12	CA	B	30	CA	68.94	1.0
A	12	CA	B	173	CA	53.62	1.0
A	12	CA	B	437	CA	75.67	1.0
A	1	CA	B	30	CA	41.16	1.0
A	1	CA	B	173	CA	48.87	1.0
A	1	CA	B	437	CA	45.64	1.0
A	103	CA	B	30	CA	48.64	1.0
A	103	CA	B	173	CA	34.56	1.0
A	103	CA	B	437	CA	50.81	1.0

1LFD

A	43	CA	B	224	CA	29.13	1.0
A	43	CA	B	303	CA	39.69	1.0
A	43	CA	B	328	CA	50.22	1.0
A	51	CA	B	224	CA	18.57	1.0
A	51	CA	B	303	CA	33.88	1.0
A	51	CA	B	328	CA	39.2	1.0
A	71	CA	B	224	CA	26.15	1.0
A	71	CA	B	303	CA	32.86	1.0
A	71	CA	B	328	CA	51.52	1.0
A	14	CA	B	224	CA	35.13	1.0
A	14	CA	B	303	CA	30.67	1.0
A	14	CA	B	328	CA	45.94	1.0

1M10

A	214	CA	B	527	CA	44.16	1.0
A	214	CA	B	574	CA	50.33	1.0
A	214	CA	B	634	CA	30.51	1.0
A	221	CA	B	527	CA	35.96	1.0
A	221	CA	B	574	CA	44.16	1.0
A	221	CA	B	634	CA	20.83	1.0
A	31	CA	B	527	CA	52.8	1.0
A	31	CA	B	574	CA	30.33	1.0
A	31	CA	B	634	CA	45.67	1.0
A	19	CA	B	527	CA	39.53	1.0
A	19	CA	B	574	CA	18.88	1.0
A	19	CA	B	634	CA	42.65	1.0

Restraint Sets

1MAH

A	4	CA	B	220	CA	48.69	1.0
A	4	CA	B	268	CA	39.26	1.0
A	4	CA	B	468	CA	38.88	1.0
A	15	CA	B	220	CA	52	1.0
A	15	CA	B	268	CA	41.22	1.0
A	15	CA	B	468	CA	42.3	1.0
A	45	CA	B	220	CA	49.66	1.0
A	45	CA	B	268	CA	28.88	1.0
A	45	CA	B	468	CA	51.61	1.0
A	31	CA	B	220	CA	38.07	1.0
A	31	CA	B	268	CA	31.33	1.0
A	31	CA	B	468	CA	37.49	1.0

1MLO

A	58	CA	B	29	CA	55.74	1.0
A	58	CA	B	457	CA	27.52	1.0
A	58	CA	B	630	CA	64.82	1.0
A	68	CA	B	29	CA	66.45	1.0
A	68	CA	B	457	CA	38.67	1.0
A	68	CA	B	630	CA	77.25	1.0
A	35	CA	B	29	CA	46.02	1.0
A	35	CA	B	457	CA	52.65	1.0
A	35	CA	B	630	CA	71.08	1.0
A	47	CA	B	29	CA	63.66	1.0
A	47	CA	B	457	CA	44.73	1.0
A	47	CA	B	630	CA	67.85	1.0

1MLC

A	6	CA	B	123	CA	82.74	1.0
A	6	CA	B	187	CA	87.62	1.0
A	6	CA	B	66	CA	51.39	1.0
A	99	CA	B	123	CA	83.91	1.0
A	99	CA	B	187	CA	88.82	1.0
A	99	CA	B	66	CA	37.11	1.0
A	67	CA	B	66	CA	23.84	1.0
A	67	CA	B	123	CA	62.01	1.0
A	67	CA	B	187	CA	68.45	1.0
A	47	CA	B	66	CA	18.92	1.0
A	47	CA	B	123	CA	63.85	1.0
A	47	CA	B	187	CA	66.72	1.0

1MQ8

A	146	CA	B	10	CA	25.35	1.0
A	146	CA	B	67	CA	24.92	1.0
A	146	CA	B	181	CA	48.51	1.0
A	217	CA	B	10	CA	44	1.0
A	217	CA	B	67	CA	24.85	1.0
A	217	CA	B	181	CA	74.32	1.0
A	189	CA	B	10	CA	46.88	1.0
A	189	CA	B	67	CA	40.65	1.0
A	189	CA	B	181	CA	64.29	1.0
A	267	CA	B	10	CA	30.48	1.0

Restraint Sets

A	267	CA	B	67	CA	21.97	1.0
A	267	CA	B	181	CA	59.66	1.0

1N2C

A	173	CA	B	319	CA	77.27	1.0
A	173	CA	B	670	CA	10.97	1.0
A	173	CA	B	1389	CA	115.46	1.0
A	229	CA	B	319	CA	97.05	1.0
A	229	CA	B	670	CA	49.24	1.0
A	229	CA	B	1389	CA	125.03	1.0
A	533	CA	B	319	CA	84.11	1.0
A	533	CA	B	670	CA	58.09	1.0
A	533	CA	B	1389	CA	144.64	1.0
A	474	CA	B	319	CA	55.18	1.0
A	474	CA	B	670	CA	49.05	1.0
A	474	CA	B	1389	CA	102.1	1.0

1N8O

A	7	CA	B	472	CA	34.66	1.0
A	7	CA	B	544	CA	61.32	1.0
A	7	CA	B	121	CA	60.65	1.0
A	35	CA	B	472	CA	33.67	1.0
A	35	CA	B	544	CA	43.01	1.0
A	35	CA	B	121	CA	58.22	1.0
A	76	CA	B	121	CA	36.65	1.0
A	76	CA	B	472	CA	11.76	1.0
A	76	CA	B	544	CA	45.45	1.0
A	89	CA	B	121	CA	25.75	1.0
A	89	CA	B	472	CA	29.33	1.0
A	89	CA	B	544	CA	38.55	1.0

1NCA

A	105	CA	B	66	CA	37.31	1.0
A	105	CA	B	208	CA	82.14	1.0
A	105	CA	B	371	CA	31.54	1.0
A	143	CA	B	66	CA	35.23	1.0
A	143	CA	B	208	CA	79.96	1.0
A	143	CA	B	371	CA	38.88	1.0
A	329	CA	B	66	CA	20.91	1.0
A	329	CA	B	208	CA	59.61	1.0
A	329	CA	B	371	CA	28.64	1.0
A	266	CA	B	66	CA	36.5	1.0
A	266	CA	B	208	CA	89.28	1.0
A	266	CA	B	371	CA	57.65	1.0

1NSN

A	56	CA	B	123	CA	73.52	1.0
A	56	CA	B	187	CA	81.02	1.0
A	56	CA	B	66	CA	20.79	1.0
A	133	CA	B	123	CA	62.13	1.0
A	133	CA	B	187	CA	72.19	1.0
A	133	CA	B	66	CA	27.36	1.0
A	116	CA	B	66	CA	44.7	1.0

Restraint Sets

A	116	CA	B	123	CA	76.35	1.0
A	116	CA	B	187	CA	87.6	1.0
A	70	CA	B	66	CA	25.88	1.0
A	70	CA	B	123	CA	62.77	1.0
A	70	CA	B	187	CA	70.03	1.0

1NW9

A	265	CA	B	143	CA	47.1	1.0
A	265	CA	B	221	CA	45.86	1.0
A	265	CA	B	392	CA	32.58	1.0
A	270	CA	B	143	CA	50.13	1.0
A	270	CA	B	221	CA	48.1	1.0
A	270	CA	B	392	CA	39.89	1.0
A	346	CA	B	143	CA	18.85	1.0
A	346	CA	B	221	CA	30.34	1.0
A	346	CA	B	392	CA	19.82	1.0
A	326	CA	B	143	CA	34.48	1.0
A	326	CA	B	221	CA	27.94	1.0
A	326	CA	B	392	CA	20.02	1.0

1OC0

A	38	CA	B	71	CA	28.62	1.0
A	38	CA	B	129	CA	30.34	1.0
A	38	CA	B	270	CA	55.03	1.0
A	16	CA	B	71	CA	34.84	1.0
A	16	CA	B	129	CA	24.15	1.0
A	16	CA	B	270	CA	67.94	1.0
A	27	CA	B	71	CA	33.25	1.0
A	27	CA	B	129	CA	13.84	1.0
A	27	CA	B	270	CA	54.98	1.0
A	11	CA	B	71	CA	23.06	1.0
A	11	CA	B	129	CA	24.8	1.0
A	11	CA	B	270	CA	56.95	1.0

1OFU

A	32	CA	B	94	CA	37.63	1.0
A	32	CA	B	123	CA	31.35	1.0
A	32	CA	B	322	CA	65.07	1.0
A	66	CA	B	94	CA	53.93	1.0
A	66	CA	B	123	CA	58.58	1.0
A	66	CA	B	322	CA	81.67	1.0
A	175	CA	B	94	CA	52.24	1.0
A	175	CA	B	123	CA	39.2	1.0
A	175	CA	B	322	CA	82.86	1.0
A	274	CA	B	94	CA	24.9	1.0
A	274	CA	B	123	CA	14.38	1.0
A	274	CA	B	322	CA	51.34	1.0

1OPH

A	171	CA	B	44	CA	55.71	1.0
A	171	CA	B	128	CA	66.17	1.0
A	171	CA	B	356	CA	14.41	1.0
A	243	CA	B	44	CA	62.03	1.0

Restraint Sets

A	243	CA	B	128	CA	86.32	1.0
A	243	CA	B	356	CA	33.01	1.0
A	202	CA	B	44	CA	68.91	1.0
A	202	CA	B	128	CA	89.2	1.0
A	202	CA	B	356	CA	28.37	1.0
A	38	CA	B	44	CA	40.35	1.0
A	38	CA	B	128	CA	72.04	1.0
A	38	CA	B	356	CA	22.63	1.0

1OYV

A	60	CA	B	7	CA	23.49	1.0
A	60	CA	B	18	CA	35.69	1.0
A	60	CA	B	133	CA	18.05	1.0
A	3	CA	B	7	CA	50.36	1.0
A	3	CA	B	18	CA	63	1.0
A	3	CA	B	133	CA	31.11	1.0
A	24	CA	B	7	CA	24.82	1.0
A	24	CA	B	18	CA	40.57	1.0
A	24	CA	B	133	CA	37.05	1.0
A	46	CA	B	7	CA	33.43	1.0
A	46	CA	B	18	CA	48.17	1.0
A	46	CA	B	133	CA	36.11	1.0

1PPE

A	4	CA	B	165	CA	19.83	1.0
A	4	CA	B	243	CA	29.23	1.0
A	4	CA	B	20	CA	22.48	1.0
A	15	CA	B	165	CA	32.18	1.0
A	15	CA	B	243	CA	37.01	1.0
A	15	CA	B	20	CA	31.31	1.0
A	25	CA	B	20	CA	23.8	1.0
A	25	CA	B	165	CA	34.6	1.0
A	25	CA	B	243	CA	42.86	1.0
A	1	CA	B	20	CA	26.89	1.0
A	1	CA	B	165	CA	18.46	1.0
A	1	CA	B	243	CA	37.12	1.0

1PVH

A	109	CA	B	198	CA	25.38	1.0
A	109	CA	B	184	CA	43.66	1.0
A	109	CA	B	208	CA	35.34	1.0
A	135	CA	B	198	CA	28.52	1.0
A	135	CA	B	184	CA	32.99	1.0
A	135	CA	B	208	CA	52.95	1.0
A	153	CA	B	184	CA	54.57	1.0
A	153	CA	B	198	CA	43.38	1.0
A	153	CA	B	208	CA	55.8	1.0
A	58	CA	B	184	CA	61.78	1.0
A	58	CA	B	198	CA	42	1.0
A	58	CA	B	208	CA	47.61	1.0

1PXV

A	18	CA	B	256	CA	55.41	1.0
---	----	----	---	-----	----	-------	-----

Restraint Sets

A	18	CA	B	270	CA	44.69	1.0
A	18	CA	B	223	CA	52.61	1.0
A	106	CA	B	256	CA	41.11	1.0
A	106	CA	B	270	CA	33.92	1.0
A	106	CA	B	223	CA	43.58	1.0
A	97	CA	B	223	CA	34.72	1.0
A	97	CA	B	256	CA	24.14	1.0
A	97	CA	B	270	CA	13.38	1.0
A	48	CA	B	223	CA	63.78	1.0
A	48	CA	B	256	CA	54.6	1.0
A	48	CA	B	270	CA	37.63	1.0

1QA9

A	87	CA	B	8	CA	28.74	1.0
A	87	CA	B	102	CA	33.51	1.0
A	87	CA	B	31	CA	24.32	1.0
A	92	CA	B	8	CA	40.55	1.0
A	92	CA	B	102	CA	47.42	1.0
A	92	CA	B	31	CA	30.15	1.0
A	47	CA	B	8	CA	34.86	1.0
A	47	CA	B	31	CA	13.94	1.0
A	47	CA	B	102	CA	40.93	1.0
A	21	CA	B	8	CA	38.04	1.0
A	21	CA	B	31	CA	28.56	1.0
A	21	CA	B	102	CA	37.73	1.0

1QFW

A	44	CA	B	671	CA	23.53	1.0
A	44	CA	B	612	CA	39.1	1.0
A	44	CA	B	258	CA	22.53	1.0
A	68	CA	B	671	CA	57.78	1.0
A	68	CA	B	612	CA	65.37	1.0
A	68	CA	B	258	CA	68.99	1.0
A	211	CA	B	258	CA	25.96	1.0
A	211	CA	B	612	CA	52.69	1.0
A	211	CA	B	671	CA	34.29	1.0
A	163	CA	B	258	CA	33.33	1.0
A	163	CA	B	612	CA	34.83	1.0
A	163	CA	B	671	CA	14.99	1.0

1R0R

A	34	CA	B	7	CA	25.94	1.0
A	34	CA	B	18	CA	39.81	1.0
A	34	CA	B	133	CA	25.93	1.0
A	43	CA	B	7	CA	36.99	1.0
A	43	CA	B	18	CA	50.51	1.0
A	43	CA	B	133	CA	22.32	1.0
A	14	CA	B	7	CA	29.63	1.0
A	14	CA	B	18	CA	41.31	1.0
A	14	CA	B	133	CA	13.79	1.0
A	9	CA	B	7	CA	36.7	1.0
A	9	CA	B	18	CA	49	1.0
A	9	CA	B	133	CA	26.81	1.0

Restraint Sets

1R6Q

A	55	CA	B	4	CA	45.86	1.0
A	55	CA	B	19	CA	27.39	1.0
A	55	CA	B	140	CA	58.62	1.0
A	68	CA	B	4	CA	52.72	1.0
A	68	CA	B	19	CA	39.64	1.0
A	68	CA	B	140	CA	58.58	1.0
A	20	CA	B	4	CA	39	1.0
A	20	CA	B	19	CA	39.86	1.0
A	20	CA	B	140	CA	27.95	1.0
A	94	CA	B	4	CA	36.7	1.0
A	94	CA	B	19	CA	29.48	1.0
A	94	CA	B	140	CA	49.35	1.0

1R8S

A	74	CA	B	40	CA	26.9	1.0
A	74	CA	B	81	CA	36.96	1.0
A	74	CA	B	136	CA	38.78	1.0
A	85	CA	B	40	CA	42.67	1.0
A	85	CA	B	81	CA	47.58	1.0
A	85	CA	B	136	CA	47.33	1.0
A	219	CA	B	40	CA	38.44	1.0
A	219	CA	B	81	CA	13.44	1.0
A	219	CA	B	136	CA	39.07	1.0
A	240	CA	B	40	CA	31.48	1.0
A	240	CA	B	81	CA	21.12	1.0
A	240	CA	B	136	CA	47.66	1.0

1RLB

A	147	CA	B	76	CA	71.86	1.0
A	147	CA	B	281	CA	40.66	1.0
A	147	CA	B	681	CA	82.28	1.0
A	78	CA	B	76	CA	46.91	1.0
A	78	CA	B	281	CA	26.8	1.0
A	78	CA	B	681	CA	65.17	1.0
A	94	CA	B	76	CA	34.93	1.0
A	94	CA	B	281	CA	18.12	1.0
A	94	CA	B	681	CA	46.1	1.0
A	34	CA	B	76	CA	41.6	1.0
A	34	CA	B	281	CA	7.89	1.0
A	34	CA	B	681	CA	52.53	1.0

1RV6

A	145	CA	B	46	CA	23.96	1.0
A	145	CA	B	225	CA	13.32	1.0
A	145	CA	B	244	CA	45.88	1.0
A	215	CA	B	46	CA	36.87	1.0
A	215	CA	B	225	CA	19.46	1.0
A	215	CA	B	244	CA	50.7	1.0
A	161	CA	B	46	CA	43.6	1.0
A	161	CA	B	225	CA	27.2	1.0
A	161	CA	B	244	CA	61.65	1.0

Restraint Sets

A	200	CA	B	46	CA	28.9	1.0
A	200	CA	B	225	CA	21.1	1.0
A	200	CA	B	244	CA	36.88	1.0

1S1Q

A	23	CA	B	5	CA	38.54	1.0
A	23	CA	B	10	CA	34.55	1.0
A	23	CA	B	137	CA	35.36	1.0
A	34	CA	B	5	CA	49.99	1.0
A	34	CA	B	10	CA	44.88	1.0
A	34	CA	B	137	CA	42.66	1.0
A	63	CA	B	5	CA	39.75	1.0
A	63	CA	B	10	CA	38.37	1.0
A	63	CA	B	137	CA	23.26	1.0
A	47	CA	B	5	CA	25.91	1.0
A	47	CA	B	10	CA	22.03	1.0
A	47	CA	B	137	CA	27.64	1.0

1SBB

A	211	CA	B	13	CA	38.69	1.0
A	211	CA	B	246	CA	77.09	1.0
A	211	CA	B	48	CA	18.5	1.0
A	37	CA	B	13	CA	49.86	1.0
A	37	CA	B	246	CA	85.62	1.0
A	37	CA	B	48	CA	38.18	1.0
A	239	CA	B	13	CA	32.07	1.0
A	239	CA	B	48	CA	29.88	1.0
A	239	CA	B	246	CA	80.34	1.0
A	193	CA	B	13	CA	58.03	1.0
A	193	CA	B	48	CA	46.36	1.0
A	193	CA	B	246	CA	103.99	1.0

1SYX

A	47	CA	B	11	CA	42.41	1.0
A	47	CA	B	36	CA	42.58	1.0
A	47	CA	B	124	CA	18.08	1.0
A	54	CA	B	11	CA	44.79	1.0
A	54	CA	B	36	CA	43.81	1.0
A	54	CA	B	124	CA	22.62	1.0
A	60	CA	B	11	CA	45.35	1.0
A	60	CA	B	36	CA	38.12	1.0
A	60	CA	B	124	CA	28.14	1.0
A	31	CA	B	11	CA	47.08	1.0
A	31	CA	B	36	CA	37.57	1.0
A	31	CA	B	124	CA	29.1	1.0

1T6B

A	72	CA	B	568	CA	90.91	1.0
A	72	CA	B	732	CA	39.24	1.0
A	72	CA	B	76	CA	123.78	1.0
A	111	CA	B	568	CA	70.84	1.0
A	111	CA	B	732	CA	19.36	1.0
A	111	CA	B	76	CA	108.2	1.0

Restraint Sets

A	154	CA	B	76	CA	90.12	1.0
A	154	CA	B	568	CA	68.85	1.0
A	154	CA	B	732	CA	37.08	1.0
A	133	CA	B	76	CA	112.87	1.0
A	133	CA	B	568	CA	77.43	1.0
A	133	CA	B	732	CA	45.58	1.0

1TMQ

A	538	CA	B	29	CA	58.51	1.0
A	538	CA	B	162	CA	53.05	1.0
A	538	CA	B	412	CA	61.2	1.0
A	554	CA	B	29	CA	35.88	1.0
A	554	CA	B	162	CA	29.97	1.0
A	554	CA	B	412	CA	48.96	1.0
A	572	CA	B	29	CA	49.5	1.0
A	572	CA	B	162	CA	35.64	1.0
A	572	CA	B	412	CA	48.68	1.0
A	588	CA	B	29	CA	60.71	1.0
A	588	CA	B	162	CA	40.03	1.0
A	588	CA	B	412	CA	67.69	1.0

1UDI

A	27	CA	B	20	CA	44.47	1.0
A	27	CA	B	56	CA	35	1.0
A	27	CA	B	233	CA	35.43	1.0
A	21	CA	B	20	CA	34.92	1.0
A	21	CA	B	56	CA	21.42	1.0
A	21	CA	B	233	CA	35.37	1.0
A	49	CA	B	20	CA	47.36	1.0
A	49	CA	B	56	CA	34.48	1.0
A	49	CA	B	233	CA	39.83	1.0
A	63	CA	B	20	CA	35.22	1.0
A	63	CA	B	56	CA	18.06	1.0
A	63	CA	B	233	CA	45.21	1.0

1US7

A	149	CA	B	10	CA	40.38	1.0
A	149	CA	B	51	CA	53.58	1.0
A	149	CA	B	187	CA	51.53	1.0
A	199	CA	B	10	CA	22.74	1.0
A	199	CA	B	51	CA	44.88	1.0
A	199	CA	B	187	CA	48.87	1.0
A	245	CA	B	10	CA	37.39	1.0
A	245	CA	B	51	CA	17.48	1.0
A	245	CA	B	187	CA	40.45	1.0
A	170	CA	B	10	CA	29.25	1.0
A	170	CA	B	51	CA	30.92	1.0
A	170	CA	B	187	CA	27.26	1.0

1VFB

A	5	CA	B	66	CA	26.16	1.0
A	5	CA	B	12	CA	47.89	1.0
A	5	CA	B	271	CA	31.34	1.0

Restraint Sets

A	14	CA	B	66	CA	19.29	1.0
A	14	CA	B	12	CA	41.94	1.0
A	14	CA	B	271	CA	38.4	1.0
A	67	CA	B	12	CA	66.69	1.0
A	67	CA	B	66	CA	48.01	1.0
A	67	CA	B	271	CA	48.61	1.0
A	117	CA	B	12	CA	40.58	1.0
A	117	CA	B	66	CA	26.95	1.0
A	117	CA	B	271	CA	13.82	1.0

1WDW

A	95	CA	B	63	CA	48.57	1.0
A	95	CA	B	175	CA	36.44	1.0
A	95	CA	B	413	CA	86.82	1.0
A	146	CA	B	63	CA	64.6	1.0
A	146	CA	B	175	CA	19.85	1.0
A	146	CA	B	413	CA	91.49	1.0
A	229	CA	B	63	CA	62.47	1.0
A	229	CA	B	175	CA	31.65	1.0
A	229	CA	B	413	CA	85.13	1.0
A	99	CA	B	63	CA	54.47	1.0
A	99	CA	B	175	CA	39.41	1.0
A	99	CA	B	413	CA	93.1	1.0

1WEJ

A	12	CA	B	123	CA	83.67	1.0
A	12	CA	B	187	CA	84.43	1.0
A	12	CA	B	63	CA	37.95	1.0
A	53	CA	B	123	CA	75.74	1.0
A	53	CA	B	187	CA	81.23	1.0
A	53	CA	B	63	CA	31.72	1.0
A	23	CA	B	63	CA	21.94	1.0
A	23	CA	B	123	CA	76.62	1.0
A	23	CA	B	187	CA	79.51	1.0
A	88	CA	B	63	CA	38.52	1.0
A	88	CA	B	123	CA	72.52	1.0
A	88	CA	B	187	CA	73.59	1.0

1WQ1

A	73	CA	B	778	CA	36.05	1.0
A	73	CA	B	842	CA	30.96	1.0
A	73	CA	B	1034	CA	46.08	1.0
A	88	CA	B	778	CA	16	1.0
A	88	CA	B	842	CA	44.44	1.0
A	88	CA	B	1034	CA	29.93	1.0
A	150	CA	B	778	CA	29.94	1.0
A	150	CA	B	842	CA	40.48	1.0
A	150	CA	B	1034	CA	52.27	1.0
A	38	CA	B	778	CA	27.74	1.0
A	38	CA	B	842	CA	20.69	1.0
A	38	CA	B	1034	CA	50.8	1.0

1XD3

Restraint Sets

A	23	CA	B	39	CA	26.45	1.0
A	23	CA	B	76	CA	50.82	1.0
A	23	CA	B	142	CA	40.38	1.0
A	34	CA	B	39	CA	26	1.0
A	34	CA	B	76	CA	40.84	1.0
A	34	CA	B	142	CA	39.85	1.0
A	63	CA	B	39	CA	23.93	1.0
A	63	CA	B	76	CA	53.23	1.0
A	63	CA	B	142	CA	52.48	1.0
A	47	CA	B	39	CA	13.96	1.0
A	47	CA	B	76	CA	43.57	1.0
A	47	CA	B	142	CA	38.14	1.0

1XQS

A	230	CA	B	88	CA	22.76	1.0
A	230	CA	B	110	CA	49.88	1.0
A	230	CA	B	348	CA	43.86	1.0
A	249	CA	B	88	CA	35.14	1.0
A	249	CA	B	110	CA	43.13	1.0
A	249	CA	B	348	CA	30.9	1.0
A	355	CA	B	88	CA	46.22	1.0
A	355	CA	B	110	CA	72.42	1.0
A	355	CA	B	348	CA	46.84	1.0
A	285	CA	B	88	CA	25.3	1.0
A	285	CA	B	110	CA	31.86	1.0
A	285	CA	B	348	CA	34.81	1.0

1XU1

A	101	CA	B	116	CA	37.02	1.0
A	101	CA	B	416	CA	46.53	1.0
A	101	CA	B	747	CA	35.32	1.0
A	85	CA	B	116	CA	19.51	1.0
A	85	CA	B	416	CA	42.12	1.0
A	85	CA	B	747	CA	29.87	1.0
A	73	CA	B	116	CA	32.66	1.0
A	73	CA	B	416	CA	52.13	1.0
A	73	CA	B	747	CA	36.68	1.0
A	91	CA	B	116	CA	28.56	1.0
A	91	CA	B	416	CA	41.17	1.0
A	91	CA	B	747	CA	39.32	1.0

1Y64

A	143	CA	B	1388	CA	57.85	1.0
A	143	CA	B	1664	CA	39.09	1.0
A	143	CA	B	1759	CA	67.13	1.0
A	194	CA	B	1388	CA	71.75	1.0
A	194	CA	B	1664	CA	68.56	1.0
A	194	CA	B	1759	CA	40.37	1.0
A	364	CA	B	1388	CA	28.84	1.0
A	364	CA	B	1664	CA	66.16	1.0
A	364	CA	B	1759	CA	86.77	1.0
A	287	CA	B	1388	CA	69.82	1.0
A	287	CA	B	1664	CA	43.94	1.0

Restraint Sets

A 287 CA B 1759 CA 58.12 1.0

1YVB

A 19 CA B 56 CA 36.83 1.0
 A 19 CA B 124 CA 44.09 1.0
 A 19 CA B 138 CA 11.38 1.0
 A 35 CA B 56 CA 38.51 1.0
 A 35 CA B 124 CA 57.28 1.0
 A 35 CA B 138 CA 29.89 1.0
 A 48 CA B 56 CA 33.54 1.0
 A 48 CA B 124 CA 50.93 1.0
 A 48 CA B 138 CA 23.91 1.0
 A 77 CA B 56 CA 50.48 1.0
 A 77 CA B 124 CA 62.13 1.0
 A 77 CA B 138 CA 29.65 1.0

1Z0K

A 458 CA B 30 CA 27.01 1.0
 A 458 CA B 93 CA 27.18 1.0
 A 458 CA B 170 CA 34.82 1.0
 A 475 CA B 30 CA 18.87 1.0
 A 475 CA B 93 CA 42.29 1.0
 A 475 CA B 170 CA 32.97 1.0
 A 501 CA B 30 CA 41.74 1.0
 A 501 CA B 93 CA 39.95 1.0
 A 501 CA B 170 CA 42.12 1.0
 A 480 CA B 30 CA 19.51 1.0
 A 480 CA B 93 CA 39.6 1.0
 A 480 CA B 170 CA 22.23 1.0

1Z5Y

A 16 CA B 62 CA 33.58 1.0
 A 16 CA B 81 CA 21.81 1.0
 A 16 CA B 181 CA 39.17 1.0
 A 54 CA B 62 CA 48.37 1.0
 A 54 CA B 81 CA 36.52 1.0
 A 54 CA B 181 CA 63.3 1.0
 A 64 CA B 62 CA 45.45 1.0
 A 64 CA B 81 CA 18.55 1.0
 A 64 CA B 181 CA 50.57 1.0
 A 70 CA B 62 CA 35.71 1.0
 A 70 CA B 81 CA 7.68 1.0
 A 70 CA B 181 CA 40.02 1.0

1ZHH

A 78 CA B 39 CA 42.58 1.0
 A 78 CA B 125 CA 49.25 1.0
 A 78 CA B 279 CA 36.62 1.0
 A 90 CA B 39 CA 51.88 1.0
 A 90 CA B 125 CA 63.9 1.0
 A 90 CA B 279 CA 29.98 1.0
 A 227 CA B 39 CA 51.15 1.0
 A 227 CA B 125 CA 65.56 1.0

Restraint Sets

A	227	CA	B	279	CA	74.24	1.0
A	260	CA	B	39	CA	18.9	1.0
A	260	CA	B	125	CA	35.52	1.0
A	260	CA	B	279	CA	47.56	1.0

1ZHI

A	517	CA	B	105	CA	30.12	1.0
A	517	CA	B	116	CA	19.82	1.0
A	517	CA	B	15	CA	41.87	1.0
A	523	CA	B	105	CA	26.62	1.0
A	523	CA	B	116	CA	14.01	1.0
A	523	CA	B	15	CA	47.36	1.0
A	569	CA	B	15	CA	67.28	1.0
A	569	CA	B	105	CA	56.04	1.0
A	569	CA	B	116	CA	47.03	1.0
A	492	CA	B	15	CA	42.39	1.0
A	492	CA	B	105	CA	17.54	1.0
A	492	CA	B	116	CA	10.64	1.0

1ZLI

A	2	CA	B	94	CA	41.98	1.0
A	2	CA	B	121	CA	10.46	1.0
A	2	CA	B	216	CA	47.12	1.0
A	5	CA	B	94	CA	37.51	1.0
A	5	CA	B	121	CA	11.99	1.0
A	5	CA	B	216	CA	43.33	1.0
A	51	CA	B	94	CA	51.46	1.0
A	51	CA	B	121	CA	34.65	1.0
A	51	CA	B	216	CA	28.8	1.0
A	28	CA	B	94	CA	48.38	1.0
A	28	CA	B	121	CA	5.93	1.0
A	28	CA	B	216	CA	47.44	1.0

1ZM4

A	445	CA	B	14	CA	65.86	1.0
A	445	CA	B	295	CA	84.1	1.0
A	445	CA	B	719	CA	35.2	1.0
A	521	CA	B	14	CA	93.15	1.0
A	521	CA	B	295	CA	118.62	1.0
A	521	CA	B	719	CA	45.06	1.0
A	431	CA	B	14	CA	91.61	1.0
A	431	CA	B	295	CA	98.01	1.0
A	431	CA	B	719	CA	51.11	1.0
A	576	CA	B	14	CA	63.32	1.0
A	576	CA	B	295	CA	84.17	1.0
A	576	CA	B	719	CA	17.2	1.0

2A5T

A	62	CA	B	66	CA	33.97	1.0
A	62	CA	B	77	CA	36.8	1.0
A	62	CA	B	162	CA	31.58	1.0
A	74	CA	B	66	CA	36.68	1.0
A	74	CA	B	77	CA	36.11	1.0

Restraint Sets

A	74	CA	B	162	CA	37.04	1.0
A	181	CA	B	66	CA	22.65	1.0
A	181	CA	B	77	CA	18.93	1.0
A	181	CA	B	162	CA	48.48	1.0
A	283	CA	B	66	CA	37.17	1.0
A	283	CA	B	77	CA	45.22	1.0
A	283	CA	B	162	CA	26.98	1.0

2A9K

A	52	CA	B	36	CA	58.82	1.0
A	52	CA	B	76	CA	39.84	1.0
A	52	CA	B	139	CA	54.75	1.0
A	70	CA	B	36	CA	48.54	1.0
A	70	CA	B	76	CA	19.51	1.0
A	70	CA	B	139	CA	47.57	1.0
A	197	CA	B	36	CA	41.99	1.0
A	197	CA	B	76	CA	28.96	1.0
A	197	CA	B	139	CA	48.9	1.0
A	141	CA	B	36	CA	45.1	1.0
A	141	CA	B	76	CA	37.86	1.0
A	141	CA	B	139	CA	28.42	1.0

2ABZ

A	41	CA	B	28	CA	43.84	1.0
A	41	CA	B	121	CA	35.02	1.0
A	41	CA	B	216	CA	18.58	1.0
A	35	CA	B	28	CA	51.69	1.0
A	35	CA	B	121	CA	36.33	1.0
A	35	CA	B	216	CA	23.86	1.0
A	24	CA	B	28	CA	64.53	1.0
A	24	CA	B	121	CA	47.52	1.0
A	24	CA	B	216	CA	35.17	1.0
A	15	CA	B	28	CA	42.33	1.0
A	15	CA	B	121	CA	20.89	1.0
A	15	CA	B	216	CA	30.42	1.0

2AJF

A	353	CA	B	21	CA	54.72	1.0
A	353	CA	B	56	CA	54.38	1.0
A	353	CA	B	598	CA	81.31	1.0
A	404	CA	B	21	CA	21.27	1.0
A	404	CA	B	56	CA	41.6	1.0
A	404	CA	B	598	CA	67.72	1.0
A	486	CA	B	21	CA	37.58	1.0
A	486	CA	B	56	CA	23.21	1.0
A	486	CA	B	598	CA	57.23	1.0
A	470	CA	B	21	CA	18.59	1.0
A	470	CA	B	56	CA	35.53	1.0
A	470	CA	B	598	CA	72.31	1.0

2AYO

A	23	CA	B	148	CA	21.95	1.0
A	23	CA	B	162	CA	38.29	1.0

Restraint Sets

A	23	CA	B	308	CA	26.32	1.0
A	34	CA	B	148	CA	34.13	1.0
A	34	CA	B	162	CA	44.29	1.0
A	34	CA	B	308	CA	19.48	1.0
A	73	CA	B	148	CA	24.85	1.0
A	73	CA	B	162	CA	26.8	1.0
A	73	CA	B	308	CA	35.2	1.0
A	47	CA	B	148	CA	15.49	1.0
A	47	CA	B	162	CA	27.78	1.0
A	47	CA	B	308	CA	28.93	1.0

2B42

A	147	CA	B	186	CA	33.08	1.0
A	147	CA	B	260	CA	41.59	1.0
A	147	CA	B	96	CA	65.91	1.0
A	155	CA	B	186	CA	31.92	1.0
A	155	CA	B	260	CA	46.6	1.0
A	155	CA	B	96	CA	59.79	1.0
A	122	CA	B	96	CA	41.33	1.0
A	122	CA	B	186	CA	26.64	1.0
A	122	CA	B	260	CA	22.72	1.0
A	87	CA	B	96	CA	52.85	1.0
A	87	CA	B	186	CA	10.28	1.0
A	87	CA	B	260	CA	38.76	1.0

2B4J

A	347	CA	B	119	CA	55.45	1.0
A	347	CA	B	207	CA	63.2	1.0
A	347	CA	B	419	CA	43.33	1.0
A	370	CA	B	119	CA	44.56	1.0
A	370	CA	B	207	CA	46.86	1.0
A	370	CA	B	419	CA	17.71	1.0
A	425	CA	B	119	CA	61.2	1.0
A	425	CA	B	207	CA	55.84	1.0
A	425	CA	B	419	CA	41.89	1.0
A	366	CA	B	119	CA	32.73	1.0
A	366	CA	B	207	CA	38.16	1.0
A	366	CA	B	419	CA	16.1	1.0

2BTF

A	40	CA	B	57	CA	62.33	1.0
A	40	CA	B	231	CA	71.24	1.0
A	40	CA	B	364	CA	32.1	1.0
A	60	CA	B	57	CA	49.01	1.0
A	60	CA	B	231	CA	47.03	1.0
A	60	CA	B	364	CA	36.81	1.0
A	136	CA	B	57	CA	53.54	1.0
A	136	CA	B	231	CA	74.05	1.0
A	136	CA	B	364	CA	16.95	1.0
A	117	CA	B	57	CA	44.21	1.0
A	117	CA	B	231	CA	57.87	1.0
A	117	CA	B	364	CA	24.93	1.0

Restraint Sets

2COL

A	28	CA	B	364	CA	50.2	1.0
A	28	CA	B	455	CA	58.04	1.0
A	28	CA	B	572	CA	15.5	1.0
A	50	CA	B	364	CA	48.44	1.0
A	50	CA	B	455	CA	37.15	1.0
A	50	CA	B	572	CA	29.46	1.0
A	87	CA	B	364	CA	58.52	1.0
A	87	CA	B	455	CA	57.93	1.0
A	87	CA	B	572	CA	34.95	1.0
A	103	CA	B	364	CA	52.73	1.0
A	103	CA	B	455	CA	51.43	1.0
A	103	CA	B	572	CA	15.9	1.0

2CFH

A	4	CA	B	17	CA	10.5	1.0
A	4	CA	B	34	CA	28	1.0
A	4	CA	B	71	CA	28.03	1.0
A	26	CA	B	17	CA	33.54	1.0
A	26	CA	B	34	CA	21.6	1.0
A	26	CA	B	71	CA	48.49	1.0
A	147	CA	B	17	CA	25.89	1.0
A	147	CA	B	34	CA	34.61	1.0
A	147	CA	B	71	CA	42.06	1.0
A	52	CA	B	17	CA	13.11	1.0
A	52	CA	B	34	CA	33.01	1.0
A	52	CA	B	71	CA	44.87	1.0

2FD6

A	13	CA	B	121	CA	111.48	1.0
A	13	CA	B	183	CA	113.31	1.0
A	13	CA	B	53	CA	59.91	1.0
A	212	CA	B	121	CA	71.45	1.0
A	212	CA	B	183	CA	69.72	1.0
A	212	CA	B	53	CA	33	1.0
A	179	CA	B	53	CA	15.47	1.0
A	179	CA	B	121	CA	72.33	1.0
A	179	CA	B	183	CA	76.18	1.0
A	267	CA	B	53	CA	32.33	1.0
A	267	CA	B	121	CA	65.76	1.0
A	267	CA	B	183	CA	65.77	1.0

2FJU

A	25	CA	B	79	CA	41.39	1.0
A	25	CA	B	187	CA	39.4	1.0
A	25	CA	B	563	CA	84.42	1.0
A	104	CA	B	79	CA	17.43	1.0
A	104	CA	B	187	CA	52.89	1.0
A	104	CA	B	563	CA	76.62	1.0
A	131	CA	B	79	CA	47.34	1.0
A	131	CA	B	187	CA	73.63	1.0
A	131	CA	B	563	CA	95	1.0
A	47	CA	B	79	CA	45.57	1.0

Restraint Sets

A	47	CA	B	187	CA	43.01	1.0
A	47	CA	B	563	CA	96.56	1.0

2G77

A	96	CA	B	250	CA	49.34	1.0
A	96	CA	B	415	CA	38.86	1.0
A	96	CA	B	471	CA	27.92	1.0
A	160	CA	B	250	CA	66.27	1.0
A	160	CA	B	415	CA	46.94	1.0
A	160	CA	B	471	CA	46.2	1.0
A	79	CA	B	250	CA	62.54	1.0
A	79	CA	B	415	CA	64.17	1.0
A	79	CA	B	471	CA	29.21	1.0
A	61	CA	B	250	CA	38.42	1.0
A	61	CA	B	415	CA	28.36	1.0
A	61	CA	B	471	CA	35.81	1.0

2H7V

A	63	CA	B	442	CA	37.77	1.0
A	63	CA	B	588	CA	17.47	1.0
A	63	CA	B	659	CA	77.05	1.0
A	130	CA	B	442	CA	67.15	1.0
A	130	CA	B	588	CA	42.12	1.0
A	130	CA	B	659	CA	81.11	1.0
A	48	CA	B	442	CA	67.64	1.0
A	48	CA	B	588	CA	27.12	1.0
A	48	CA	B	659	CA	104.38	1.0
A	30	CA	B	442	CA	49.24	1.0
A	30	CA	B	588	CA	25.68	1.0
A	30	CA	B	659	CA	71.69	1.0

2HLE

A	89	CA	B	18	CA	43.79	1.0
A	89	CA	B	117	CA	50.2	1.0
A	89	CA	B	155	CA	23.59	1.0
A	166	CA	B	18	CA	45.44	1.0
A	166	CA	B	117	CA	46.21	1.0
A	166	CA	B	155	CA	24.19	1.0
A	71	CA	B	18	CA	35.58	1.0
A	71	CA	B	117	CA	41.67	1.0
A	71	CA	B	155	CA	45.25	1.0
A	123	CA	B	18	CA	28.24	1.0
A	123	CA	B	117	CA	30.19	1.0
A	123	CA	B	155	CA	9.53	1.0

2HMI

A	123	CA	B	79	CA	128.09	1.0
A	123	CA	B	196	CA	96.13	1.0
A	123	CA	B	899	CA	105.6	1.0
A	187	CA	B	79	CA	128.82	1.0
A	187	CA	B	196	CA	92.96	1.0
A	187	CA	B	899	CA	109.18	1.0
A	357	CA	B	79	CA	70.07	1.0

Restraint Sets

A	357	CA	B	196	CA	54.31	1.0
A	357	CA	B	899	CA	67.64	1.0
A	60	CA	B	79	CA	90.07	1.0
A	60	CA	B	196	CA	81.05	1.0
A	60	CA	B	899	CA	47.46	1.0

2HQS

A	85	CA	B	65	CA	56.35	1.0
A	85	CA	B	89	CA	81.43	1.0
A	85	CA	B	282	CA	39.82	1.0
A	97	CA	B	65	CA	64.13	1.0
A	97	CA	B	89	CA	89.25	1.0
A	97	CA	B	282	CA	40.72	1.0
A	140	CA	B	65	CA	54.68	1.0
A	140	CA	B	89	CA	79.18	1.0
A	140	CA	B	282	CA	26.6	1.0
A	114	CA	B	65	CA	26.9	1.0
A	114	CA	B	89	CA	51.53	1.0
A	114	CA	B	282	CA	25.31	1.0

2HRK

A	24	CA	B	80	CA	43.62	1.0
A	24	CA	B	162	CA	24.23	1.0
A	24	CA	B	195	CA	44.48	1.0
A	92	CA	B	80	CA	44.37	1.0
A	92	CA	B	162	CA	17.99	1.0
A	92	CA	B	195	CA	61.49	1.0
A	110	CA	B	80	CA	28.8	1.0
A	110	CA	B	162	CA	23.3	1.0
A	110	CA	B	195	CA	49.9	1.0
A	112	CA	B	80	CA	31.9	1.0
A	112	CA	B	162	CA	27.65	1.0
A	112	CA	B	195	CA	54.98	1.0

2I25

A	5	CA	B	94	CA	28.3	1.0
A	5	CA	B	59	CA	39.76	1.0
A	5	CA	B	111	CA	62.88	1.0
A	14	CA	B	94	CA	32.98	1.0
A	14	CA	B	59	CA	35.98	1.0
A	14	CA	B	111	CA	59.61	1.0
A	117	CA	B	59	CA	29.56	1.0
A	117	CA	B	94	CA	22.26	1.0
A	117	CA	B	111	CA	52.49	1.0
A	47	CA	B	59	CA	28.24	1.0
A	47	CA	B	94	CA	8.06	1.0
A	47	CA	B	111	CA	41.74	1.0

2I9B

A	94	CA	B	13	CA	26.8	1.0
A	94	CA	B	112	CA	39.18	1.0
A	94	CA	B	212	CA	53.89	1.0
A	20	CA	B	13	CA	25.71	1.0

Restraint Sets

A	20	CA	B	112	CA	21.95	1.0
A	20	CA	B	212	CA	32.21	1.0
A	132	CA	B	13	CA	48.43	1.0
A	132	CA	B	112	CA	44.7	1.0
A	132	CA	B	212	CA	67.12	1.0
A	77	CA	B	13	CA	18.45	1.0
A	77	CA	B	112	CA	40.82	1.0
A	77	CA	B	212	CA	60.4	1.0

2IDO

A	11	CA	B	60	CA	30.19	1.0
A	11	CA	B	113	CA	33.24	1.0
A	11	CA	B	151	CA	31.93	1.0
A	44	CA	B	60	CA	23.07	1.0
A	44	CA	B	113	CA	39.3	1.0
A	44	CA	B	151	CA	29.31	1.0
A	76	CA	B	60	CA	11.2	1.0
A	76	CA	B	113	CA	27.72	1.0
A	76	CA	B	151	CA	40.12	1.0
A	51	CA	B	60	CA	28.28	1.0
A	51	CA	B	113	CA	40.45	1.0
A	51	CA	B	151	CA	40.34	1.0

2JOT

A	14	CA	B	127	CA	33.45	1.0
A	14	CA	B	260	CA	40.71	1.0
A	14	CA	B	181	CA	15.93	1.0
A	110	CA	B	127	CA	47.77	1.0
A	110	CA	B	260	CA	46.98	1.0
A	110	CA	B	181	CA	29.81	1.0
A	67	CA	B	127	CA	29.75	1.0
A	67	CA	B	181	CA	14.3	1.0
A	67	CA	B	260	CA	20.2	1.0
A	31	CA	B	127	CA	37.87	1.0
A	31	CA	B	181	CA	25.27	1.0
A	31	CA	B	260	CA	25.76	1.0

2J7P

A	41	CA	B	7	CA	22.49	1.0
A	41	CA	B	24	CA	28.27	1.0
A	41	CA	B	178	CA	50.99	1.0
A	59	CA	B	7	CA	30.14	1.0
A	59	CA	B	24	CA	32.49	1.0
A	59	CA	B	178	CA	73.94	1.0
A	164	CA	B	7	CA	46.13	1.0
A	164	CA	B	24	CA	65.76	1.0
A	164	CA	B	178	CA	34.02	1.0
A	129	CA	B	7	CA	49.74	1.0
A	129	CA	B	24	CA	64.51	1.0
A	129	CA	B	178	CA	54.12	1.0

2JEL

A	17	CA	B	123	CA	85.89	1.0
---	----	----	---	-----	----	-------	-----

Restraint Sets

A	17	CA	B	184	CA	90.43	1.0
A	17	CA	B	66	CA	42.58	1.0
A	48	CA	B	123	CA	83.51	1.0
A	48	CA	B	184	CA	87.76	1.0
A	48	CA	B	66	CA	32.95	1.0
A	58	CA	B	66	CA	37.19	1.0
A	58	CA	B	123	CA	75.27	1.0 5
A	58	CA	B	184	CA	77.24	1.0
A	68	CA	B	66	CA	27.4	1.0
A	68	CA	B	123	CA	62.8	1.0
A	68	CA	B	184	CA	70.1	1.0

2MTA

A	12	CA	B	457	CA	52.13	1.0
A	12	CA	B	357	CA	52.18	1.0
A	12	CA	B	63	CA	26.44	1.0
A	26	CA	B	457	CA	40.07	1.0
A	26	CA	B	357	CA	45.28	1.0
A	26	CA	B	63	CA	25.46	1.0
A	64	CA	B	63	CA	44.72	1.0
A	64	CA	B	357	CA	30.91	1.0
A	64	CA	B	457	CA	59.39	1.0
A	105	CA	B	63	CA	49.78	1.0
A	105	CA	B	357	CA	45.21	1.0
A	105	CA	B	457	CA	62.23	1.0

2NZ8

A	24	CA	B	1232	CA	24.9	1.0
A	24	CA	B	1353	CA	24.03	1.0
A	24	CA	B	1532	CA	53.63	1.0
A	104	CA	B	1232	CA	42.45	1.0
A	104	CA	B	1353	CA	31.54	1.0
A	104	CA	B	1532	CA	41.03	1.0
A	33	CA	B	1232	CA	12.96	1.0
A	33	CA	B	1353	CA	32.17	1.0
A	33	CA	B	1532	CA	45.71	1.0
A	131	CA	B	1232	CA	33.59	1.0
A	131	CA	B	1353	CA	56.67	1.0
A	131	CA	B	1532	CA	42.77	1.0

2O3B

A	16	CA	B	135	CA	30.98	1.0
A	16	CA	B	152	CA	23.66	1.0
A	16	CA	B	262	CA	58.99	1.0
A	43	CA	B	135	CA	29.47	1.0
A	43	CA	B	152	CA	28.83	1.0
A	43	CA	B	262	CA	58.8	1.0
A	118	CA	B	135	CA	30.99	1.0
A	118	CA	B	152	CA	30.96	1.0
A	118	CA	B	262	CA	64.11	1.0
A	86	CA	B	135	CA	27.15	1.0
A	86	CA	B	152	CA	28.06	1.0
A	86	CA	B	262	CA	57.65	1.0

Restraint Sets

208V

A	12	CA	B	20	CA	54.85	1.0
A	12	CA	B	116	CA	60.4	1.0
A	12	CA	B	196	CA	27.26	1.0
A	33	CA	B	20	CA	36.82	1.0
A	33	CA	B	116	CA	37.54	1.0
A	33	CA	B	196	CA	20.31	1.0
A	105	CA	B	20	CA	56.99	1.0
A	105	CA	B	116	CA	56.11	1.0
A	105	CA	B	196	CA	43.04	1.0
A	2	CA	B	20	CA	48.81	1.0
A	2	CA	B	116	CA	43.33	1.0
A	2	CA	B	196	CA	23.06	1.0

200B

A	23	CA	B	932	CA	20.49	1.0
A	23	CA	B	941	CA	20.03	1.0
A	23	CA	B	955	CA	28.8	1.0
A	34	CA	B	932	CA	24.63	1.0
A	34	CA	B	941	CA	18.08	1.0
A	34	CA	B	955	CA	34.72	1.0
A	47	CA	B	932	CA	7.03	1.0
A	47	CA	B	941	CA	15.35	1.0
A	47	CA	B	955	CA	14.3	1.0
A	64	CA	B	932	CA	17.54	1.0
A	64	CA	B	941	CA	23.93	1.0
A	64	CA	B	955	CA	30.1	1.0

200R

A	101	CA	B	282	CA	35.01	1.0
A	101	CA	B	361	CA	43.87	1.0
A	101	CA	B	514	CA	54.19	1.0
A	113	CA	B	282	CA	34.62	1.0
A	113	CA	B	361	CA	64.27	1.0
A	113	CA	B	514	CA	42.53	1.0
A	167	CA	B	282	CA	58.36	1.0
A	167	CA	B	361	CA	71.57	1.0
A	167	CA	B	514	CA	55.13	1.0
A	47	CA	B	282	CA	47.36	1.0
A	47	CA	B	361	CA	62.78	1.0
A	47	CA	B	514	CA	64.69	1.0

20T3

A	85	CA	B	147	CA	45.26	1.0
A	85	CA	B	166	CA	36.88	1.0
A	85	CA	B	262	CA	34.26	1.0
A	104	CA	B	147	CA	62.98	1.0
A	104	CA	B	166	CA	57.21	1.0
A	104	CA	B	262	CA	42.28	1.0
A	65	CA	B	147	CA	35.78	1.0
A	65	CA	B	166	CA	42.07	1.0
A	65	CA	B	262	CA	49.61	1.0

Restraint Sets

A	50	CA	B	147	CA	43.92	1.0
A	50	CA	B	166	CA	49.93	1.0
A	50	CA	B	262	CA	20.35	1.0

2OUL

A	102	CA	B	42	CA	46.39	1.0
A	102	CA	B	56	CA	30.92	1.0
A	102	CA	B	178	CA	46.86	1.0
A	82	CA	B	42	CA	64.33	1.0
A	82	CA	B	56	CA	48.44	1.0
A	82	CA	B	178	CA	56.43	1.0
A	93	CA	B	42	CA	36.38	1.0
A	93	CA	B	56	CA	31.65	1.0
A	93	CA	B	178	CA	31.46	1.0
A	63	CA	B	42	CA	34.82	1.0
A	63	CA	B	56	CA	20.58	1.0
A	63	CA	B	178	CA	38.05	1.0

2OZA

A	179	CA	B	124	CA	39.97	1.0
A	179	CA	B	260	CA	49.41	1.0
A	179	CA	B	346	CA	54.17	1.0
A	293	CA	B	124	CA	51.86	1.0
A	293	CA	B	260	CA	32.82	1.0
A	293	CA	B	346	CA	54.69	1.0
A	86	CA	B	124	CA	65.08	1.0
A	86	CA	B	260	CA	74.5	1.0
A	86	CA	B	346	CA	53.9	1.0
A	216	CA	B	124	CA	33.23	1.0
A	216	CA	B	260	CA	46.69	1.0
A	216	CA	B	346	CA	53.7	1.0

2PCC

A	14	CA	B	39	CA	10.77	1.0
A	14	CA	B	98	CA	34.93	1.0
A	14	CA	B	240	CA	32.23	1.0
A	50	CA	B	39	CA	29.76	1.0
A	50	CA	B	98	CA	46.46	1.0
A	50	CA	B	240	CA	35.46	1.0
A	23	CA	B	39	CA	27.61	1.0
A	23	CA	B	98	CA	52.31	1.0
A	23	CA	B	240	CA	38.19	1.0
A	-4	CA	B	39	CA	26.43	1.0
A	-4	CA	B	98	CA	37.84	1.0
A	-4	CA	B	240	CA	54.45	1.0

2SIC

A	47	CA	B	17	CA	57.5	1.0
A	47	CA	B	116	CA	43.66	1.0
A	47	CA	B	260	CA	47.16	1.0
A	100	CA	B	17	CA	37.25	1.0
A	100	CA	B	116	CA	32.72	1.0
A	100	CA	B	260	CA	29.54	1.0

Restraint Sets

A	23	CA	B	17	CA	46.35	1.0
A	23	CA	B	116	CA	49.38	1.0
A	23	CA	B	260	CA	35.79	1.0
A	67	CA	B	17	CA	41.36	1.0
A	67	CA	B	116	CA	26.77	1.0
A	67	CA	B	260	CA	27.5	1.0

2SNI

A	32	CA	B	17	CA	50.5	1.0
A	32	CA	B	116	CA	40.66	1.0
A	32	CA	B	260	CA	39.36	1.0
A	42	CA	B	17	CA	49.03	1.0
A	42	CA	B	116	CA	47.99	1.0
A	42	CA	B	260	CA	35.06	1.0
A	60	CA	B	17	CA	27.67	1.0
A	60	CA	B	116	CA	28.28	1.0
A	60	CA	B	260	CA	22.49	1.0
A	54	CA	B	17	CA	41.37	1.0
A	54	CA	B	116	CA	26.28	1.0
A	54	CA	B	260	CA	29.76	1.0

2UUY

A	66	CA	B	171	CA	37.29	1.0
A	66	CA	B	242	CA	38.71	1.0
A	66	CA	B	26	CA	33.35	1.0
A	70	CA	B	171	CA	39.71	1.0
A	70	CA	B	242	CA	43.23	1.0
A	70	CA	B	26	CA	38.48	1.0
A	28	CA	B	26	CA	34.56	1.0
A	28	CA	B	171	CA	30.46	1.0
A	28	CA	B	242	CA	52.32	1.0
A	37	CA	B	26	CA	24.84	1.0
A	37	CA	B	171	CA	14	1.0
A	37	CA	B	242	CA	31.95	1.0

2VDB

A	26	CA	B	7	CA	49.69	1.0
A	26	CA	B	366	CA	20.1	1.0
A	26	CA	B	564	CA	80.89	1.0
A	38	CA	B	7	CA	32.14	1.0
A	38	CA	B	366	CA	36.19	1.0
A	38	CA	B	564	CA	75.99	1.0
A	-1	CA	B	7	CA	43.8	1.0
A	-1	CA	B	366	CA	47.17	1.0
A	-1	CA	B	564	CA	89.16	1.0
A	20	CA	B	7	CA	47.05	1.0
A	20	CA	B	366	CA	27.22	1.0
A	20	CA	B	564	CA	86.21	1.0

2VIS

A	189	CA		1186	CA	70.43	1.0
A	189	CA		1358	CA	22.69	1.0
A	189	CA		168	CA	21.2	1.0

Restraint Sets

A	287	CA	I186	CA	111.21	1.0
A	287	CA	I358	CA	65.36	1.0
A	287	CA	I68	CA	66.39	1.0
A	171	CA	I68	CA	57.55	1.0
A	171	CA	I186	CA	87.58	1.0
A	171	CA	I358	CA	39.47	1.0
A	143	CA	I68	CA	28.77	1.0
A	143	CA	I186	CA	68.5	1.0
A	143	CA	I358	CA	29.18	1.0

2Z0E

A	10	CA	B 39	CA	59.13	1.0
A	10	CA	B 133	CA	37.95	1.0
A	10	CA	B 337	CA	44.01	1.0
A	26	CA	B 39	CA	68.04	1.0
A	26	CA	B 133	CA	48.49	1.0
A	26	CA	B 337	CA	42.42	1.0
A	76	CA	B 39	CA	41.28	1.0
A	76	CA	B 133	CA	14.58	1.0
A	76	CA	B 337	CA	25.39	1.0
A	93	CA	B 39	CA	46.55	1.0
A	93	CA	B 133	CA	36.63	1.0
A	93	CA	B 337	CA	18.3	1.0

3BP8

A	55	CA	B 56	CA	21.38	1.0
A	55	CA	B 279	CA	65.47	1.0
A	55	CA	B 638	CA	82.43	1.0
A	85	CA	B 56	CA	29.43	1.0
A	85	CA	B 279	CA	68.03	1.0
A	85	CA	B 638	CA	95.62	1.0
A	34	CA	B 56	CA	10.53	1.0
A	34	CA	B 279	CA	58.1	1.0
A	34	CA	B 638	CA	76.63	1.0
A	64	CA	B 56	CA	27.73	1.0
A	64	CA	B 279	CA	43.83	1.0
A	64	CA	B 638	CA	80.04	1.0

3CPH

A	42	CA	B 31	CA	25.57	1.0
A	42	CA	B 67	CA	49.4	1.0
A	42	CA	B 183	CA	62.92	1.0
A	105	CA	B 31	CA	37.21	1.0
A	105	CA	B 67	CA	38.6	1.0
A	105	CA	B 183	CA	76.99	1.0
A	87	CA	B 31	CA	25.04	1.0
A	87	CA	B 67	CA	23.63	1.0
A	87	CA	B 183	CA	50.74	1.0
A	185	CA	B 31	CA	45.4	1.0
A	185	CA	B 67	CA	39.33	1.0
A	185	CA	B 183	CA	64.42	1.0

3D5S

Restraint Sets

A	37	CA	B	24	CA	28.74	1.0
A	37	CA	B	50	CA	9.04	1.0
A	37	CA	B	215	CA	40.73	1.0
A	55	CA	B	24	CA	31.21	1.0
A	55	CA	B	50	CA	31.18	1.0
A	55	CA	B	215	CA	46.08	1.0
A	15	CA	B	24	CA	41.11	1.0
A	15	CA	B	50	CA	37.64	1.0
A	15	CA	B	215	CA	38.86	1.0
A	33	CA	B	24	CA	38.53	1.0
A	33	CA	B	50	CA	17.83	1.0
A	33	CA	B	215	CA	48.62	1.0

3SGQ

A	29	CA	B	236	CA	39.84	1.0
A	29	CA	B	84	CA	30.92	1.0
A	29	CA	B	134	CA	34.9	1.0
A	22	CA	B	236	CA	31.99	1.0
A	22	CA	B	84	CA	22.36	1.0
A	22	CA	B	134	CA	32.89	1.0
A	9	CA	B	84	CA	38.01	1.0
A	9	CA	B	134	CA	37.81	1.0
A	9	CA	B	236	CA	36.87	1.0
A	15	CA	B	84	CA	31.25	1.0
A	15	CA	B	134	CA	22.42	1.0
A	15	CA	B	236	CA	25.76	1.0

4CPA

A	17	CA	B	27	CA	52.88	1.0
A	17	CA	B	121	CA	33.4	1.0
A	17	CA	B	216	CA	30.76	1.0
A	22	CA	B	27	CA	44.02	1.0
A	22	CA	B	121	CA	20.14	1.0
A	22	CA	B	216	CA	35.01	1.0
A	30	CA	B	27	CA	45.44	1.0
A	30	CA	B	121	CA	34.35	1.0
A	30	CA	B	216	CA	19.13	1.0
A	2	CA	B	27	CA	50.79	1.0
A	2	CA	B	121	CA	24.59	1.0
A	2	CA	B	216	CA	44.09	1.0

7CEI

A	493	CA	B	13	CA	38.51	1.0
A	493	CA	B	25	CA	20.32	1.0
A	493	CA	B	76	CA	41.25	1.0
A	508	CA	B	13	CA	34.3	1.0
A	508	CA	B	25	CA	25.89	1.0
A	508	CA	B	76	CA	35.28	1.0
A	531	CA	B	13	CA	26.26	1.0
A	531	CA	B	25	CA	18.75	1.0
A	531	CA	B	76	CA	19.59	1.0
A	573	CA	B	13	CA	45.36	1.0
A	573	CA	B	25	CA	31.15	1.0

Restraint Sets

A 573 CA B 76 CA 39.95 1.0

9QFW

A 44 CA B 224 CA 51.33 1.0
 A 44 CA B 213 CA 72.1 1.0
 A 44 CA B 73 CA 64.6 1.0
 A 68 CA B 224 CA 32.01 1.0
 A 68 CA B 213 CA 46.26 1.0
 A 68 CA B 73 CA 29.78 1.0
 A 102 CA B 73 CA 41.68 1.0
 A 102 CA B 213 CA 60.64 1.0
 A 102 CA B 224 CA 40.83 1.0
 A 17 CA B 73 CA 22.87 1.0
 A 17 CA B 213 CA 37.05 1.0
 A 17 CA B 224 CA 21.35 1.0

BOYV

A 60 CA B 7 CA 48.76 1.0
 A 60 CA B 18 CA 64.12 1.0
 A 60 CA B 133 CA 49.84 1.0
 A 3 CA B 7 CA 23.4 1.0
 A 3 CA B 18 CA 35.8 1.0
 A 3 CA B 133 CA 18.23 1.0
 A 116 CA B 7 CA 37.61 1.0
 A 116 CA B 18 CA 50.71 1.0
 A 116 CA B 133 CA 18.5 1.0
 A 86 CA B 7 CA 22.21 1.0
 A 86 CA B 18 CA 37.89 1.0
 A 86 CA B 133 CA 30.38 1.0

Restraint Sets

:

:

RMSD100 -XTAL

RMSD100 of the best scoring cluster with respect to the crystal structure.

Structure	6 restraints	9 restraints	12 restraints
1AHW	5.52	2.14	1.51
1BVK	7.37	2.07	1.29
1DQJ	5.52	2.61	0.87
1E6J	2.72	1.71	0.84
1JPS	6.46	3.17	1.04
1MLC	6.48	4.29	0.80
1VFB	5.98	2.64	0.63
1WEJ	2.31	1.08	0.66
2FD6	6.17	5.79	1.46
2I25	6.26	1.41	0.86
2VIS	8.71	8.35	3.19
1BJ1	4.94	4.75	1.97
1FSK	5.77	5.08	0.56
1I9R	7.36	6.68	0.61
1IQD	5.71	5.74	0.54
1K4C	4.32	5.07	0.36
1KXQ	5.84	7.90	0.38
1NCA	7.76	5.97	0.30
1NSN	5.69	4.47	1.23
1QFW	7.84	6.44	0.83
2JEL	3.10	3.53	1.51
1AVX	4.84	3.41	0.51
1AY7	8.57	5.11	0.71
1BVN	6.08	6.25	0.38
1CGI	5.38	5.36	1.09
1CLV	3.67	5.11	0.36
1D6R	10.44	10.13	0.95
1DFJ	11.04	12.77	0.97
1E6E	4.34	2.08	1.01
1EAW	9.12	8.66	0.46
1EWY	4.20	1.36	0.86
1EZU	8.33	5.93	1.48
1F34	9.92	1.24	0.61
1FLE	3.63	3.16	1.08
1GL1	1.92	2.19	0.85
1GXD	11.30	11.71	10.37
1HIA	5.71	5.72	0.87
1JTG	8.41	10.24	1.62
1MAH	3.50	2.82	0.54
1N8O	5.40	3.95	0.70
1OC0	2.16	0.94	0.94
1OPH	6.80	6.90	0.86
1OYV	6.52	1.97	0.75
1PPE	9.79	9.72	0.38
1R0R	3.28	3.20	2.48
1TMQ	10.92	10.14	0.48
1UDI	4.97	1.26	0.61
1YVB	12.48	13.29	10.58
2ABZ	4.17	4.44	0.73
2B42	6.71	5.15	0.42

RMSD100 -XTAL

2J0T	8.73	1.46	1.21
2MTA	5.90	1.13	0.45
2O8V	7.93	8.08	2.72
2OUL	11.88	11.15	11.43
2PCC	6.10	0.74	0.41
2SIC	8.12	1.95	0.39
2SNI	2.20	0.43	0.35
2UUY	10.10	10.95	12.17
3SGQ	8.99	8.20	0.54
4CPA	2.34	1.45	0.74
7CEI	9.81	1.43	1.23
1A2K	9.99	10.93	0.89
1AK4	7.88	7.08	0.94
1AKJ	8.04	5.21	1.38
1AZS	12.04	11.46	4.98
1B6C	3.95	2.73	1.16
1BUH	4.04	1.82	1.03
1E96	7.85	3.62	0.58
1EFN	5.05	0.90	0.84
1F51	5.86	4.43	0.73
1FC2	3.10	1.14	1.09
1FCC	4.03	3.97	5.92
1FFW	8.58	1.14	1.06
1FQJ	12.03	8.96	0.56
1GCQ	7.15	5.28	1.36
1GHQ	6.11	5.02	1.68
1GLA	5.13	0.96	0.51
1GPW	10.72	1.64	1.57
1H9D	7.96	9.56	1.17
1HCF	8.05	6.53	1.00
1HE1	6.90	4.84	0.66
1I4D	6.79	1.68	0.96
1J2J	8.67	6.80	0.94
1JWH	6.18	0.91	0.83
1K74	10.67	4.41	0.77
1KAC	6.52	6.74	6.25
1KLU	6.91	4.46	0.84
1KTZ	5.41	2.54	1.42
1KXP	9.47	8.40	1.07
1ML0	4.48	1.76	0.82
1OFU	8.29	0.84	0.70
1PVH	11.71	10.03	7.94
1QA9	8.48	6.03	0.82
1RLB	4.18	3.08	0.62
1RV6	7.94	5.85	2.74
1S1Q	6.51	5.68	2.05
1SBB	9.41	4.59	0.59
1T6B	5.40	4.08	0.73
1US7	11.39	8.79	0.61
1WDW	4.47	0.59	0.59
1XD3	6.54	4.06	0.98
1XU1	6.84	7.97	0.83
1Z0K	8.41	4.11	3.99

RMSD100 -XTAL

1Z5Y	7.79	5.58	1.44
1ZHH	8.98	9.40	1.96
1ZHI	8.14	7.08	1.14
2A5T	8.63	2.20	0.90
2A9K	7.24	0.76	0.84
2AJF	6.82	5.23	0.95
2AYO	4.69	4.62	1.31
2B4J	8.25	6.91	0.94
2BTF	4.72	3.66	1.40
2FJU	5.29	5.26	0.47
2G77	6.31	5.64	1.22
2HLE	9.22	8.90	1.13
2HQS	12.90	13.18	12.85
2OOB	9.05	6.46	1.03
2OOR	11.72	10.37	1.04
2VDB	2.70	2.63	1.15
3BP8	2.97	3.00	1.56
3D5S	6.37	4.22	4.18
9QFW	7.07	7.89	1.52
1BGX	12.64	2.72	0.84
1ACB	8.72	11.52	1.21
1IJK	5.37	2.81	0.97
1JIW	7.33	8.15	0.72
1KKL	7.08	2.90	1.72
1M10	9.55	2.90	1.03
1NW9	10.65	8.16	8.44
1GP2	9.82	3.49	1.44
1GRN	11.53	10.82	10.49
1HE8	5.35	4.22	0.72
1I2M	9.23	1.33	1.56
1IB1	6.36	5.90	1.98
1K5D	11.87	12.13	5.67
1LFD	7.61	6.70	0.99
1MQ8	4.80	2.24	2.00
1N2C	7.99	7.25	0.88
1R6Q	7.92	9.00	1.55
1SYX	6.11	5.96	5.40
1WQ1	5.10	1.75	0.71
1XQS	6.13	3.09	1.46
1ZM4	10.39	9.53	1.08
2CFH	5.72	4.22	3.23
2H7V	7.60	4.60	1.31
2HRK	6.98	0.79	0.78
2J7P	9.17	5.71	1.53
2NZ8	11.75	2.92	1.39
2OZA	11.92	10.98	1.20
2Z0E	7.28	7.26	1.84
BOYV	4.89	3.18	2.02
3CPH	6.94	2.88	0.94
1E4K	7.61	6.74	6.02
2HMI	6.57	5.82	2.49
1F6M	8.31	8.89	4.82
1FQ1	7.65	2.17	1.73

RMSD100 -XTAL

1PXV	9.19	7.86	1.56
1ZLI	7.73	2.25	2.00
2O3B	7.64	7.79	8.22
1ATN	7.15	4.87	1.38
1BKD	7.82	7.97	2.98
1DE4	10.39	9.69	1.19
1EER	7.41	6.51	2.06
1FAK	10.99	11.46	10.81
1H1V	10.11	5.27	5.50
1IBR	10.08	6.10	1.88
1IRA	14.11	13.96	15.41
1JK9	7.07	3.41	2.26
1JMO	8.61	8.03	2.28
1JZD	2.40	3.17	1.68
1R8S	10.53	10.38	2.02
1Y64	12.12	8.54	8.83
2C0L	6.53	10.33	8.96
2I9B	7.52	7.85	2.28
2IDO	9.01	7.65	2.37
2OT3	11.51	7.19	1.49

RMSD100 - MEAN

RMSD100 of the best scoring cluster with respect to the mean

Structure	6 restraints	9 restraints	12 restraints
1AHW	5.26	1.98	1.29
1BVK	5.17	1.86	0.08
1DQJ	4.17	2.13	0.61
1E6J	1.60	0.92	0.31
1JPS	4.33	2.62	0.80
1MLC	5.55	4.03	0.47
1VFB	4.64	2.48	0.39
1WEJ	1.73	0.93	0.45
2FD6	5.21	3.93	0.18
2I25	6.06	0.59	0.48
2VIS	6.56	4.49	0.11
1BJ1	3.55	3.24	1.76
1FSK	4.03	3.62	0.51
1I9R	5.82	5.30	0.22
1IQD	4.38	3.38	0.50
1K4C	3.87	4.39	0.24
1KXQ	4.77	6.28	0.23
1NCA	5.91	4.98	0.28
1NSN	4.13	2.94	1.11
1QFW	4.79	4.80	0.29
2JEL	2.87	3.32	1.49
1AVX	4.14	3.18	0.28
1AY7	6.02	4.54	0.53
1BVN	2.90	2.88	0.18
1CGI	4.09	4.67	0.18
1CLV	3.07	0.73	0.16
1D6R	2.57	1.42	0.25
1DFJ	6.42	0.23	0.19
1E6E	3.14	1.22	0.08
1EAW	7.87	6.66	0.22
1EWY	2.03	0.81	0.58
1EZU	4.88	1.98	0.10
1F34	6.73	0.87	0.17
1FLE	2.25	0.37	0.11
1GL1	1.44	1.84	0.26
1GXD	3.77	3.07	0.08
1HIA	3.83	3.96	0.21
1JTG	5.00	1.05	0.21
1MAH	2.19	1.42	0.33
1N8O	4.56	2.15	0.22
1OC0	1.69	0.09	0.08
1OPH	3.81	2.04	0.32
1OYV	4.18	1.80	0.61
1PPE	1.72	0.29	0.19
1R0R	2.32	2.21	2.03
1TMQ	4.06	3.72	0.21
1UDI	3.23	1.02	0.29
1YVB	4.11	1.13	0.29
2ABZ	2.84	2.32	0.38
2B42	5.21	3.66	0.17

RMSD100 - MEAN

2J0T	5.82	0.28	0.03
2MTA	4.91	1.01	0.21
2O8V	5.22	5.35	0.38
2OUL	3.30	0.47	4.63
2PCC	3.84	0.69	0.26
2SIC	5.65	1.77	0.27
2SNI	1.92	0.36	0.25
2UUY	7.23	5.88	4.20
3SGQ	4.98	6.29	0.28
4CPA	1.48	0.85	0.36
7CEI	6.22	0.86	0.43
1A2K	7.35	5.32	0.10
1AK4	4.55	4.95	0.39
1AKJ	4.59	4.44	0.08
1AZS	7.08	6.63	0.19
1B6C	3.01	1.73	0.12
1BUH	3.12	1.32	0.32
1E96	5.88	3.40	0.33
1EFN	4.07	0.68	0.56
1F51	3.35	3.31	0.23
1FC2	2.58	0.32	0.18
1FCC	2.78	2.68	0.10
1FFW	7.34	0.43	0.32
1FQJ	8.91	6.03	0.11
1GCQ	6.36	4.73	0.79
1GHQ	2.91	3.59	0.09
1GLA	4.07	0.89	0.28
1GPW	7.83	0.38	0.21
1H9D	5.77	6.35	0.24
1HCF	5.79	5.00	0.34
1HE1	4.90	3.71	0.30
1I4D	4.08	1.52	0.03
1J2J	6.83	5.58	0.19
1JWH	4.45	0.30	0.24
1K74	7.49	4.19	0.21
1KAC	3.11	0.14	3.64
1KLU	4.34	3.87	0.06
1KTZ	4.25	2.09	0.43
1KXP	6.47	5.39	0.07
1ML0	3.01	1.46	0.11
1OFU	5.70	0.53	0.33
1PVH	6.05	2.94	0.09
1QA9	7.18	4.17	0.46
1RLB	3.33	2.52	0.39
1RV6	3.51	2.78	0.19
1S1Q	4.64	2.85	1.38
1SBB	7.13	4.11	0.36
1T6B	4.02	3.68	0.17
1US7	8.29	6.31	0.21
1WDW	2.59	0.23	0.22
1XD3	4.85	3.64	0.28
1XU1	4.13	3.25	0.10
1Z0K	4.71	0.13	0.15

RMSD100 - MEAN

1Z5Y	6.06	4.42	0.05
1ZHH	6.64	5.41	0.15
1ZHI	4.71	4.38	0.12
2A5T	6.41	2.08	0.46
2A9K	6.10	0.37	0.20
2AJF	5.36	4.59	0.10
2AYO	2.33	1.47	0.10
2B4J	5.27	5.52	0.09
2BTF	3.47	2.08	0.36
2FJU	3.66	3.40	0.06
2G77	4.66	3.74	0.04
2HLE	6.08	5.52	0.30
2HQS	1.75	1.25	0.15
2OOB	5.50	4.17	0.53
2OOR	5.79	5.64	0.09
2VDB	2.05	1.94	0.06
3BP8	1.97	1.70	0.15
3D5S	4.05	0.64	0.08
9QFW	4.67	3.10	0.14
1BGX	10.49	2.54	0.28
1ACB	6.94	5.73	0.10
1IJK	3.95	2.48	0.79
1JIW	5.82	5.62	0.24
1KKL	5.55	2.46	0.20
1M10	5.64	2.37	0.31
1NW9	6.34	0.72	0.48
1GP2	7.63	1.54	0.03
1GRN	5.12	2.39	0.10
1HE8	3.70	3.28	0.20
1I2M	5.93	0.09	0.61
1IB1	3.76	0.62	0.91
1K5D	8.81	5.77	1.39
1LFD	6.34	4.46	0.29
1MQ8	3.29	1.71	0.32
1N2C	5.33	3.88	0.25
1R6Q	6.02	3.79	0.17
1SYX	3.63	0.42	0.50
1WQ1	1.66	1.59	0.24
1XQS	4.67	2.54	0.03
1ZM4	4.11	3.46	0.09
2CFH	4.60	2.29	0.05
2H7V	5.65	3.25	0.03
2HRK	4.35	0.28	0.29
2J7P	6.08	3.72	0.04
2NZ8	6.45	2.14	0.11
2OZA	7.95	7.86	0.11
2Z0E	5.26	3.76	0.22
BOYV	3.86	2.35	1.05
3CPH	4.37	2.29	0.02
1E4K	5.36	3.46	2.29
2HMI	3.91	4.03	0.23
1F6M	5.00	3.01	0.19
1FQ1	6.47	1.51	0.04

RMSD100 - MEAN

1PXV	6.15	5.26	0.74
1ZLI	4.31	0.93	0.10
2O3B	5.33	0.09	0.21
1ATN	4.67	3.67	0.21
1BKD	3.17	3.35	0.15
1DE4	7.30	6.17	0.01
1EER	3.58	0.06	0.11
1FAK	6.34	5.78	2.55
1H1V	5.60	0.07	0.20
1IBR	4.59	2.94	0.07
1IRA	6.49	6.70	0.47
1JK9	5.53	2.69	0.15
1JMO	4.16	3.38	0.13
1JZD	1.41	1.84	0.04
1R8S	7.08	5.02	0.10
1Y64	7.55	3.53	0.09
2C0L	6.53	5.43	0.24
2I9B	5.55	5.26	0.07
2IDO	6.11	4.15	0.16
2OT3	6.28	5.68	0.04